

P. K. Lang

Das Fachwissen des Lehrenden ist

von Bedeutung

für die Qualität der Lehre

Die Qualität der Lehre

ist

von Bedeutung für die Qualität

der Ausbildung der Studierenden

Die Qualität der Lehre ist

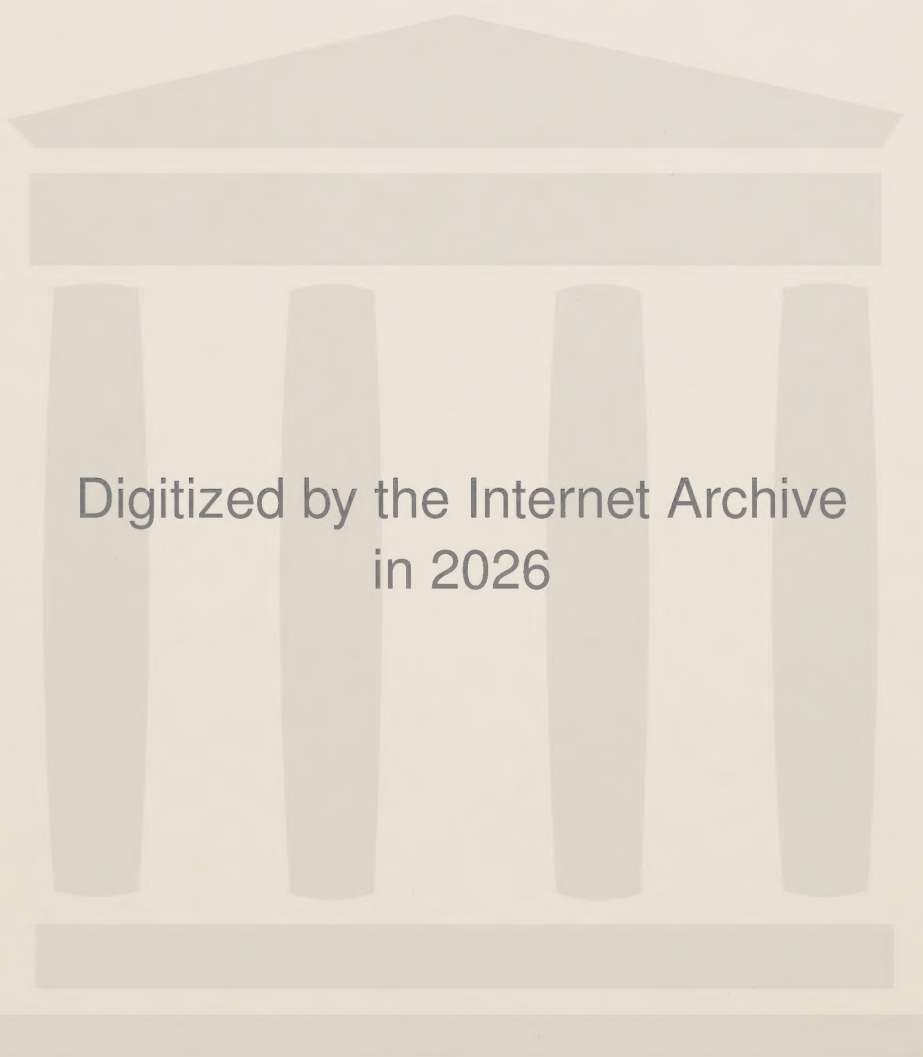
von Bedeutung für die Qualität

der Ausbildung

Die Qualität der Lehre ist

von Bedeutung

Frankfurt am Main, 1998



Digitized by the Internet Archive
in 2026

Zur Berechnung angeregter Kernzustände
aus der

Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades

der Naturwissenschaftlichen Fakultät der

Johann Wolfgang Goethe-Universität

zu Frankfurt am Main

vorgelegt von

Peter K. H a u g

aus Essen

Frankfurt am Main 1969

Gedruckt mit Genehmigung der Naturwissenschaftlichen
Fakultät der Universität Frankfurt am Main.



Dekan:	Professor Dr. H. Berckhemer
Erster Berichterstatter:	Professor Dr. G. Süßmann
Zweiter Berichterstatter:	Professor Dr. W. Greiner
Tag der mündlichen Prüfung:	20. Februar 1969

Inhaltsverzeichnis

	Seite
Abstract	1
<u>Teil I</u> : A. Einleitung und Übersicht	2
B. Vielfermionentheorie mit Green-Funktionen	6
1. Grundlagen	6
2. Green-Funktionen	10
3. Funktionalmethode	13
4. Eigenschaften der G_1 -Funktion	18
5. Eigenschaften spezieller G_2 - Funktionen	26
a) Formales	26
b) Lineare Antwortfunktion	28
c) Gleichungen für die Antwortfunktion	30
C. Näherungslösungen in der Kernphysik	34
1. Übersicht	34
2. Räumlich homogene Systeme	37
a) Basis und Symmetrien	37
b) Leiternäherung	38
c) Blasennäherung	43
3. Räumlich inhomogene Systeme	45
a) Basis und Symmetrien	45
b) Reduktion der Eigenwertgleichung	54
c) Oszillatorbasis	62

	Seite
D. Modellabhängige Rechnungen für endliche Kerne	66
1. Übersicht	66
2. Gleichungen des Modells	69
a) Allgemeines	69
b) Nukleon-Nukleon-Potential	75
3. Lösungsmethode	77
E. Ergebnisse und Diskussion	80
1. Teilchen-Loch-Anregungen in O^{16}	81
2. Teilchen-Loch-Anregungen in Ca^{40}	87
3. Zusammenfassung	91
<u>Teil II</u> : Anhang	92
A. Fouriertransformation	92
B. Sphärische Tensoren	93
C. Gleichung für L^0	98
<u>Teil III</u> : Tabellen, Abbildungen und Literaturangaben	100
A. Tabellen	100
B. Abbildungen	106
C. Literaturangaben	109
<u>Anlagen</u> : FØRTRAN-IV-Programm FINUC	

Abstract

In the framework of an exact many-body theory based on the formalism of Green's functions, we rederive an eigenvalue equation capable of describing single particle excitations of a Fermi system when the possibly singular interaction between it's constituents is known and allows for the determination of an effective two-particle interaction to be derived from it. A classification of various systems is given in terms of two dimensionless parameters which then are used to select approximations valid in atomic nuclei. For homogeneous nuclear matter the relevant equations can be very much simplified; rotational symmetries of finite nuclei in ordinary as well as in iso-space for special cases lead to a considerable reduction and an identification of system quantum numbers with two-particle quantum numbers. The effective two-particle interaction is extracted free of all adjustable parameters from a very simple nucleon-nucleon interaction by solving the corresponding integral equation for nuclear matter and using a local density approximation. We apply our method for describing those states of the doubly magic nuclei O^{16} and Ca^{40} which probably can be understood as one-particle-one-hole excitations from the ground state, i.e. low-lying negative parity levels. and -in view of the simplicity of the interaction assumed- find reasonably good agreement with experimental evidence.

Teil I :

A. Einleitung und Übersicht

Atomkerne sind der Fermistatistik gehorchende Systeme wechselwirkender Nukleonen und können im Rahmen einer nichtrelativistischen, quantenmechanischen Vielkörpertheorie beschrieben werden. Die Lösung der Bewegungsgleichungen bereitet jedoch grosse mathematische Schwierigkeiten und ist im allgemeinen weder explizit noch numerisch möglich.

Verschiedene Modellvorstellungen, die jeweils eine bestimmte Klasse von experimentellen Sachverhalten zu beschreiben vermögen, haben sich als erfolgreich erwiesen. Ein-Teilchen-Modelle wie Schalenmodell und optisches Modell fassen den Atomkern als Gas wechselwirkungsfreier Nukleonen in einem gemeinsamen, empirisch vorgegebenen Potential auf; hydrodynamische Modelle betonen den kollektiven Flüssigkeitscharakter des Systems. Eine Verbindung zwischen diesen beiden extremen Auffassungen stellt das kombinierte Kernmodell her.

Die Begründung der obigen Modelle mit den Methoden einer exakten Vielkörpertheorie ist schwierig, jedoch wurden in den letzten Jahren grosse Fortschritte erzielt. Bewährt hat sich vor allem die Formulierung des A-Teilchen-Problems mit den Methoden der Feldtheorie, die das richtige Symmetrieverhalten garantieren und die Behandlung von Partialsummationen sowie Renormierungseffekten erlauben. Als wichtigste Grössen werden dabei die Green-Funktionen im thermodynamischen Mittel eingeführt, die nach Grenzübergang mit den Grundzustandserwartungswerten spezieller Operatorprodukte übereinstimmen.

Man kann zeigen, dass die vollständige Kenntnis der Green-Funktionen eine Berechnung aller Erwartungswerte physikalischer Observablen sowie der S-Matrix und damit aller Systemeigenschaften ermöglicht.

Eine Vielzahl experimenteller Daten sowie Modellvorstellungen lassen vermuten, dass typische Kerneigenschaften wie Dichte und Volumenenergie über einen weiten Bereich von Massenzahlen konstant sind. Das legt die Untersuchung räumlich homogener Systeme nahe, die man bei Vernachlässigung von Coulombkräften als Kernmaterie bezeichnet. Wir werden in der Quasiteilchenapproximation für die Ein-Teilchen-Green-Funktion eine Näherung kennenlernen, die den Ein-Teilchen-Charakter eines solchen Systems bestimmt und die theoretische Voraussetzung für die Gültigkeit des Schalenmodells bildet. Der kollektive Aspekt kann dann durch die Annahme berücksichtigt werden, dass Kerninnere stelle einen Abschnitt Kernmaterie dar und insbesondere stimmen dort alle den Zustand beschreibenden Funktionen und Parameterwerte mit den entsprechenden Größen für Kernmaterie überein.

In Abschnitt B dieser Arbeit werden wir Grundlagen einer Viel-fermionentheorie mit Green-Funktionen angeben und mittels einer eleganten Funktionalmethode Gleichungen aufstellen, die systematische Näherungen gestatten. Dann untersuchen wir die Eigenschaften der Ein- und Zwei-Teilchen-Green-Funktionen, leiten -in Verallgemeinerung der zeitabhängigen Hartree-Fock-Theorie- eine Eigenwertgleichung für die Anregungszustände eines näherungsweise durch ein Ein-Teilchen-Modell beschrie-

benen Systems ab und klären insbesondere, wie die in diese Gleichung eingehenden Grössen zu berechnen sind.

In Abschnitt C klassifizieren wir allgemeine Vielfermionensysteme mit Hilfe zweier Ordnungsparameter und untersuchen, welche Näherungen zur Beschreibung von Atomkernen anwendbar sind. Für räumlich homogene Systeme nehmen die Beziehungen eine besonders einfache Form an. Aus dem Drehverhalten realer Kerne im R^3 und im Isoraum folgen wichtige Symmetrien, mit deren Hilfe sich die Eigenwertgleichung wesentlich reduzieren lässt. Die den Anregungsenergien des Systems entsprechenden reellen Eigenwerte der sich ergebenden nicht-hermiteschen Matrix hoher Symmetrien werden jetzt durch die Quantenzahlen Spin, Isospin und Parität der angeregten Zustände gekennzeichnet, die Komponenten der Eigenvektoren stellen die Übereinstimmungswahrscheinlichkeit dieser Zustände mit einfachen Teilchen-Loch-Anregungen aus dem Grundzustand dar. So lassen sich reine Ein-Teilchen- von komplexeren Anregungen unterscheiden und Übergangswahrscheinlichkeiten für Ein-Teilchen-Operatoren berechnen.

Abschnitt D bringt eine Übersicht über Methoden, die unseren ähnlich sind; es folgt eine detaillierte Beschreibung der in unserem Modell gemachten Näherungen und Annahmen. Wir sind in der Lage, die in die Eigenwertgleichung eingehende renormierte K-Matrix (effektive Zwei-Teilchen-Wechselwirkung) direkt aus der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung zu bestimmen und für das gewählte Yamaguchi-Potential mit hard shell explizit anzugeben. Der Bestwert des zunächst als frei betrachtbaren Renor-

mierungsfaktors stimmt sehr gut mit dem aus vergleichbaren Kernmaterierechnungen sich ergebenden Wert von 0.8 überein, sodass unser Modell faktisch parameterfrei wird.

Zum Schluss besprechen wir in Abschnitt E die für O^{16} und Ca^{40} gewonnenen Ergebnisse genauer und fassen das Wesentliche nochmals kurz zusammen.

B. Vielfermionentheorie mit Green-Funktionen

In zahlreichen Monographien, u.a. (Ab 63, Sc 64) findet man ausführliche Darstellungen der Methode der Green-Funktionen zur Beschreibung von Vielfermionensystemen. Im folgenden sollen daher nur diejenigen Grundtatsachen und Gleichungen angegeben werden, die für das Verständnis der späteren Ausführungen eine Hilfe sind.

1. Grundlagen (Su 65):

Ein System von A ununterscheidbaren Fermionen ($1...A$) wird nach Pauli durch einen total antisymmetrischen A -Teilchen-Zustandsvektor $|\Psi_A\rangle$ beschrieben, d.h. es gilt (P = Permutation):

$$|\Psi_A\rangle := |\Psi(\underline{1...A})\rangle = \text{sgn } P \cdot |\Psi(\underline{P1...PA})\rangle \quad (\text{B1.1})$$

Dementsprechend sind die den physikalischen Observablen zugeordneten Operatoren Q_A total symmetrisch:

$$Q_A := Q(\underline{1...A}) = Q(\underline{P1...PA}) \quad (\text{B1.2})$$

Die Menge aller normierbaren $|\Psi_A\rangle$ bildet den Zustandsraum $\mathcal{H}_A$, der nach Definition eines geeigneten Skalarprodukts* zu einem Hilbertraum wird. Insbesondere ist $\mathcal{H}_{\{0\}}$ der Raum aller (zeitlich und räumlich konstanten) Null-Teilchen-Zustände und enthält den Vakuumzustand

$$|> \in \mathcal{H}_{\{0\}}, \text{ mit } \langle x | > = 1, || |> || = 1 \quad (\text{B1.4})$$

*
$$\langle \Psi_A | \Psi'_A \rangle := \frac{1}{A!} \int dx_1 \dots dx_A \langle \Psi_A | x_1 \dots x_A \rangle \langle x_1 \dots x_A | \Psi'_A \rangle \quad (\text{B1.3})$$

sowie den Nullzustand

$$|0\rangle \in \mathcal{H}_{\{0\}}, \text{ mit } \langle x|0\rangle = 0, \quad || |0\rangle || = 0 \quad (\text{B1.5})$$

Ist $|\Psi_1\rangle_{v_i}$ ein vollständiger Satz von orthonormierten Zuständen aus $\mathcal{H}_{\{1\}}$ (Ein-Teilchen-Zustände), so bilden die Slaterdeterminanten

$$|\Phi_{\{v_1 \dots v_A\}}\rangle := \sum_P \text{sgn } P \cdot (|\Psi_1\rangle_{v_{P_1}} \dots |\Psi_1\rangle_{v_{P_A}}) \quad (\text{B1.6})$$

eine vollständige, orthonormierte Basis von $\mathcal{H}_{\{A\}}$. Die Operatoren $a_{v_i}^+$ werden durch

$$a_{v_A}^+ \dots a_{v_1}^+ | \rangle := |\Phi_{\{v_1 \dots v_A\}}\rangle \quad (\text{B1.7})$$

definiert, woraus zunächst für den adjungierten Operator

$$a_v | \rangle = |0\rangle \quad (\text{B1.8})$$

folgt. Zudem lassen sich die wichtigen Fermionen-Vertauschungsrelationen

$$\{a_\mu^+, a_\nu\}_+ = \delta_{\mu\nu}, \quad \{a_\mu^+, a_\nu^+\}_+ = 0, \quad + \{a_\mu, a_\nu\}_+ = 0 \quad (\text{B1.9})$$

ableiten. Da a_v^+ einen Zustand aus $\mathcal{H}_{\{A\}}$ in einen Zustand aus $\mathcal{H}_{\{A+1\}}$ überführt, deutet man diesen Operator als Erzeugungsoperator eines Fermionenzustands $|\Psi_1\rangle_v$ und nennt a_v Vernichtungsoperator. Operatoren Q_A lassen sich nach j-Teilchen-Komponenten entwickeln, wobei oftmals mit dem Zwei-Teilchen-Term abgebrochen werden kann, was der Vernachlässigung von Drei-Körper-Kräften entspricht. Man erhält so

$$Q_A = \underbrace{\sum_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta}^A a_\alpha^+ a_\beta}_{Q_A^{(1)}} + \underbrace{1/4 \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} q_{\alpha\beta,\gamma\delta}^A a_\alpha^+ a_\beta^+ a_\delta a_\gamma}_{Q_A^{(2)}} + \dots \quad (\text{B1.10})$$

und bezeichnet die Teilkomponenten $Q_A^{(1)}$ bzw. $Q_A^{(2)}$ als Ein- bzw. Zwei-Teilchen-Operator. Aus den Vertauschungsrelationen folgt für die Entwicklungskoeffizienten in der obigen Gleichung

$$q_{\alpha\beta}^A = \langle |a_{\alpha} Q_A^{(1)} a_{\beta}^+| \rangle = \langle \phi_{\{\alpha\}} | Q_A^{(1)} | \phi_{\{\beta\}} \rangle \quad (B1.11)$$

$$q_{\alpha\beta,\gamma\delta}^A = \langle | (a_{\alpha}^+ a_{\beta}^+)^+ Q_A^{(2)} a_{\gamma} a_{\delta} | \rangle = \langle \phi_{\{\alpha\beta\}} | Q_A^{(2)} | \phi_{\{\gamma\delta\}} \rangle$$

und

$$q_{\alpha\beta,\gamma\delta}^A = -q_{\beta\alpha,\gamma\delta}^A = -q_{\alpha\beta,\delta\gamma}^A \quad (B1.12)$$

Für selbstadjungierte Operatoren $Q = Q^+$ ist zudem

$$q_{\alpha\beta}^A = q_{\beta\alpha}^{A*}, \quad q_{\alpha\beta,\gamma\delta}^A = q_{\gamma\delta,\alpha\beta}^{A*} \quad (B1.13)$$

Nach Übergang in eine bestimmte Darstellung für die Ein-Teilchen-Zustände $a_{\alpha}^+ | \rangle$ können die Matrixelemente $q_{\alpha\beta}^A$ und $q_{\alpha\beta,\gamma\delta}^A$ durch Auswertung der Skalarprodukte in $\{1\}$ und $\{2\}$ berechnet werden. In der Ortsdarstellung $|x\rangle$ gilt etwa:

$$\begin{aligned} q_{\alpha\beta}^A &= \int dx'_1 dx_1 \langle \phi_{\{\alpha\}} | x'_1 \rangle Q(x'_1 x_1) \langle x_1 | \phi_{\{\beta\}} \rangle \\ q_{\alpha\beta,\gamma\delta}^A &= 1/2! \int dx'_1 dx'_2 dx_1 dx_2 \langle \phi_{\{\alpha\beta\}} | x'_1 x'_2 \rangle \cdot \\ &\quad Q(x'_1 x'_2 x_1 x_2) \langle x_1 x_2 | \phi_{\{\gamma\delta\}} \rangle \\ &= \int dx'_1 dx'_2 dx_1 dx_2 \phi_{\alpha}(x'_1) \phi_{\beta}(x'_2) Q(x'_1 x'_2 x_1 x_2) \cdot \\ &\quad (\phi_{\gamma}(x_1) \phi_{\delta}(x_2) - \phi_{\gamma}(x_2) \phi_{\delta}(x_1)) \end{aligned} \quad (B1.14)$$

Der Hamiltonoperator

$$H_A = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} + 1/4 \sum_{\alpha\beta, \gamma\delta} v_{\alpha\beta, \gamma\delta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\delta} a_{\gamma} \quad (B1.15)$$

setzt sich aus dem Ein-Teilchen-Operator $T_A^{(1)}$ der kinetischen Energie und dem Zwei-Teilchen-Operator $V_A^{(2)}$ der Wechselwirkungsenergie zusammen.

Dem Rechnen mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren entspricht als Zustandsraum die direkte Summe

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\{0\}} \oplus \mathcal{H}_{\{1\}} \oplus \mathcal{H}_{\{2\}} \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_{\{A\}} \oplus \dots \quad (B1.16)$$

und der allgemeine Operator Q ist durch

$$Q = Q_{\{0\}} \otimes Q_{\{1\}} \otimes \dots \otimes Q_{\{A\}} \otimes \dots \quad (B1.17)$$

gegeben, wobei $Q_{\{i\}}$ nur auf Zustände aus $\mathcal{H}_{\{i\}}$ wirkt. Analog zu den Formeln der Quantenstatistik definiert man den Erwartungswert von Q über das System durch

$$\langle Q \rangle^{\tau, \mu} := \frac{\text{Sp}(e^{-i\tau(H-\mu A)} Q)}{\text{Sp}(e^{-i\tau(H-\mu A)})} \quad (B1.18)$$

Hamiltonoperator H und Teilchenzahloperator

$$A := \sum_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} \quad (B1.19)$$

bestimmen zusammen mit den Parametern τ und μ die Gewichte der einzelnen Summanden. Die zulässigen Werte von τ werden durch die Forderung $\text{Im}\tau < 0$, $\text{Re}\tau \geq 0$ eingeschränkt. Einen wichtigen Spezialfall erhält man für $\tau = -i\beta$, $\beta > 0$: Der

Erwartungswert $\langle Q \rangle^{\tau=-i\beta, \mu}$ entspricht dem thermodynamischen Mittel von Q über eine grosskanonische Gesamtheit mit dem chemischen Potential μ und der Temperatur $T = \frac{1}{\beta}$ ($k=1$). Bei geeigneter Wahl der Parameter (We 67), nämlich im limes $\beta \rightarrow \infty$, mit $\mu = \frac{\partial E_0(A)}{\partial A}$ geht $\langle Q \rangle^{\tau, \mu}$ über in den Grundzustandserwartungswert $\langle Q \rangle$. Für gebundene Systeme ist μ negativ.

2. Green-Funktionen (Ma 59):

Der n -Teilchen-Green-Operator wird durch

$$\begin{aligned} G(t_{\alpha 1} \dots t_{\alpha n}, t_{\beta 1} \dots t_{\beta n}) &:= \\ \alpha 1 \dots \alpha n, \beta 1 \dots \beta n & \quad (B2.1) \\ &:= (-i)^n T(a_{\alpha 1}(t_{\alpha 1}) \dots a_{\alpha n}(t_{\alpha n}) a_{\beta n}^+(t_{\beta n}) \dots a_{\beta 1}^+(t_{\beta 1})) \end{aligned}$$

definiert, wobei der Wicksche Zeitordnungsoperator T zeitabhängige Heisenbergoperatoren in der Reihenfolge von rechts nach links wachsender Zeiten ordnet und mit dem Vorzeichen der Permutation multipliziert. Im Falle gleicher Zeitargumente sind Erzeugungsoperatoren links von Vernichtungsoperatoren anzuordnen.

Aus der Heisenbergschen Bewegungsgleichung

$$\frac{dQ}{dt} = i\{H, Q\} + \frac{\partial Q}{\partial t}, \quad \hbar = 1 \quad (B2.2)$$

für einen beliebigen Heisenbergoperator Q lassen sich Bewegungsgleichungen für die (nicht explizit zeitabhängigen) Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren und daraus solche für die Green-Operatoren gewinnen. Es ist dafür zweckmässig, eine Umeichung

$$\mathcal{H} = H - \mu A \quad (B2.3)$$

der Energieskala vorzunehmen. Dann ist

$$\alpha(t+t') = e^{it'(H-\mu A)} \alpha(t) e^{-it'(H-\mu A)}, \text{ für } \alpha = a, a^+ \quad (B2.4)$$

eine formale Lösung von (B2.2), und die Auswertung der Kommutatoren mit Hilfe von (B1.9), (B1.15), (B1.19) ergibt

$$(i\frac{\partial}{\partial t_\alpha} + \mu) a_\alpha(t_\alpha) = \sum_\gamma (t_{\alpha\gamma} + 1/2 \sum_{\beta\delta} v_{\alpha\beta, \gamma\delta} a_\beta^+(t_\alpha) a_\delta(t_\alpha)) \cdot a_\gamma(t_\alpha) \quad (B2.5)$$

Daraus folgt für $n=1,2,\dots$ die Bewegungsgleichung der Green-Operatoren (We 66):

$$\begin{aligned} (i\frac{\partial}{\partial t_{\alpha 1}} + \mu) G_{\alpha 1 \dots \alpha n, \beta 1 \dots \beta n}^{(t_{\alpha 1} \dots t_{\alpha n}, t_{\beta 1} \dots t_{\beta n})} &= \sum_{v=1}^n (-)^{v+1} \delta_{\alpha 1 \alpha v} \cdot \\ &\delta(t_{\alpha 1} - t_{\alpha v}) G_{\alpha 2 \dots \alpha n, \beta 1 \dots \beta_{v-1} \dots \beta_n}^{(t_{\alpha 2} \dots t_{\alpha n}, t_{\beta 1} \dots t_{\beta_{v-1}} \dots t_{\beta n})} + \sum_\gamma t_{\alpha 1 \gamma} \cdot \\ &G_{\gamma \alpha 2 \dots \alpha n, \beta 1 \dots \beta n}^{(t_{\alpha 1} \dots t_{\alpha n}, t_{\beta 1} \dots t_{\beta n})} - i/2 \sum_{\gamma \beta \delta} v_{\alpha 1 \beta, \gamma \delta} \cdot \\ &G_{\delta \gamma \alpha 2 \alpha 3 \dots \alpha n, \beta \beta 1 \dots \beta n}^{(t_{\alpha 1} t_{\alpha 1} t_{\alpha 2} \dots t_{\alpha n}, t_{\alpha 1} t_{\beta 1} \dots t_{\beta n})} \end{aligned} \quad (B2.6)$$

Der Null-Teilchen-Green-Operator G wird 1 gesetzt. Wichtigste Aufgabe wird es sein, dieses Gleichungssystem, das den n -Teilchen-Green-Operator mit den Green-Operatoren für $(n-1)$ und $(n+1)$ Teilchen verknüpft, durch geeignete Näherungsmethoden systematisch zu entkoppeln.

Die n -Teilchen-Green-Funktion G_n ist definiert als Erwartungswert (B1.18) des n -Teilchen-Green-Operators

$$G_{\alpha 1 \dots \alpha n, \beta 1 \dots \beta n}^{\tau, \mu}(t_{\alpha 1} \dots t_{\alpha n}, t_{\beta 1} \dots t_{\beta n}) := \left\langle G_{\alpha 1 \dots \alpha n, \beta 1 \dots \beta n}^{(t_{\alpha 1} \dots t_{\alpha n}, t_{\beta 1} \dots t_{\beta n})} \right\rangle^{\tau, \mu} \quad (B2.7)$$

sodass sich die Bewegungsgleichung für Green-Operatoren sofort auf die Green-Funktionen überträgt. Insbesondere gilt für $n=1$:

$$\begin{aligned} \sum_{\gamma} \left((i \frac{\partial}{\partial t_{\alpha}} + \mu) \delta_{\alpha\gamma} - t_{\alpha\gamma} \right) G_{\alpha\beta}^{\tau, \mu}(t_{\alpha}, t_{\beta}) &= \\ &= \delta_{\alpha\beta} \delta(t_{\alpha} - t_{\beta}) - i/2 \sum_{\gamma \delta \epsilon} v_{\alpha\gamma, \delta\epsilon} G_{\epsilon\delta, \gamma\beta}^{\tau, \mu}(t_{\alpha} t_{\alpha}, t_{\alpha} t_{\beta}) \end{aligned} \quad (B2.8)$$

wodurch die 1-Teilchen-Green-Funktion G_1

$$G_{\alpha, \beta}^{\tau, \mu}(t_{\alpha}, t_{\beta}) = -i \langle T(a_{\alpha}(t_{\alpha}) a_{\beta}^{\dagger}(t_{\beta})) \rangle^{\tau, \mu} \quad (B2.9)$$

mit der 2-Teilchen-Green-Funktion G_2

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta, \gamma\delta}^{\tau, \mu}(t_{\alpha} t_{\beta}, t_{\gamma} t_{\delta}) &= \\ &= (-i)^2 \langle T(a_{\alpha}(t_{\alpha}) a_{\beta}(t_{\beta}) a_{\delta}^{\dagger}(t_{\delta}) a_{\gamma}^{\dagger}(t_{\gamma})) \rangle^{\tau, \mu} \end{aligned} \quad (B2.10)$$

verkoppelt ist. Wichtig sind noch zwei sich durch Wahl spezieller Zeitargumente aus G_1 bzw. G_2 ergebende Funktionen, die Dichtematrix

$$\rho_{\alpha\beta}^{\tau, \mu} := G_{\alpha\beta}^{\tau, \mu}(t_{\alpha}, t_{\alpha}) \quad (B2.11)$$

die den Mittelwert des Dichteoperators

$$\rho_{\alpha\beta}(t_{\alpha}) := -i a_{\beta}^{\dagger}(t_{\alpha}) a_{\alpha}(t_{\alpha}) \quad (B2.12)$$

darstellt, und die Antwortfunktion

$$R_{\alpha_1 \alpha_2, \beta_1 \beta_2}^{\tau, \mu}(t_{\alpha_1}, t_{\alpha_2}) := G_{\alpha_1 \alpha_2, \beta_1 \beta_2}^{\tau, \mu}(t_{\alpha_1} t_{\alpha_2}, t_{\alpha_1} t_{\alpha_2}) \quad (B2.13)$$

Auf die Bedeutung der angegebenen Begriffsbildungen werden wir später zurückkommen. Wir vermerken noch die wichtige

Tatsache, dass die Green-Funktionen wegen der Homogenität der Zeit nur von Differenzen der $t_{\alpha i}, t_{\beta i}$ abhängen, sodass G_n für $n-1$ eine Funktion von $(2n-1)$ Zeitargumenten ist.

3. Funktionalmethode

Eine systematische Behandlung des gekoppelten Gleichungssystems für die Green-Funktionen wird durch verschiedene Funktionalmethoden sehr erleichtert. Wir referieren kurz die in (Br 63, Wa 64) dargelegte Formulierung. Die Grundidee ist, alle Green-Funktionen als Funktionalableitungen der verallgemeinerten Zustandssumme

$$Z^{\tau, \mu}_{\{W\}} := \text{Sp}(e^{-i\tau(\mathcal{H}+W)}) \quad (\text{B3.1})$$

nach einem Ein-Teilchen-Störoperator

$$W = \sum_{\alpha\beta} w_{\alpha\beta} a_{\alpha}^+ a_{\beta} \quad (\text{B3.2})$$

darzustellen, dessen Matrixelemente klein im Sinne der Störungstheorie sein sollen.* Beispielweise lauten die

* Wir vereinbaren

$$\begin{aligned} 1 &:= (\alpha t_{\alpha}) , \quad W(1,2) := \delta(t_{\alpha}-t_{\beta}) w_{\alpha\beta} \\ V(12,34) &:= 1/2 \delta(t_{\alpha}-t_{\beta}) \delta(t_{\gamma}-t_{\delta}) \delta(t_{\alpha}-t_{\gamma}) v_{\alpha\beta,\gamma\delta} \\ \frac{\delta A}{\delta B}(14,23) &:= \frac{\delta A(1,2)}{\delta B(3,4)} \end{aligned}$$

und benutzen die Einsteinsche Summenkonvention, derzufolge über doppelt auftretende diskrete bzw. kontinuierliche Indizes zu summieren bzw. integrieren ist. Summe und Produkt zweier vierdimensionaler Matrizen A und B sind definiert durch

$$\begin{aligned} (A+B)(12,34) &:= A(12,34)+B(12,34) \\ (A \cdot B)(12,34) &:= A(15,36) \cdot B(62,54) \\ E(12,34) &:= \delta(1,4) \delta(2,3) \\ \rightarrow (A \cdot B) \cdot C &= A \cdot (B \cdot C) = A \cdot B \cdot C , \quad E \cdot A = A \cdot E = A \end{aligned}$$

Gleichungen für die beiden ersten Green-Funktionen (nach Unterdrückung der Mittelungsparameter τ und μ):

$$G(1,2) = -\frac{1}{Z} \frac{\delta Z\{W\}}{\delta W(1,2)} \quad (\text{B3.3})$$

und

$$G(12,34) = -\frac{1}{Z} \frac{\delta^2 Z\{W\}}{\delta W(3,2) \delta W(4,1)} \quad (\text{B3.4})$$

Eine wichtige Grösse ist die Ableitung $\frac{\delta G}{\delta W}$, die die Reaktion des Systems auf die Störung W in linearer Ordnung beschreibt. Durch Differentiation von (B3.3) erhält man

$$\begin{aligned} \frac{\delta G}{\delta W}(14,23) &= G(14,32) + G(1,2)G(4,3) \\ &= -G(14,23) + G(1,2)G(4,3) \end{aligned} \quad (\text{B3.5})$$

Bequem sind die Abkürzungen

$$L(14,32) := \frac{\delta G}{\delta W}(14,32), \quad L^0(14,32) := G(1,2)G(4,3) \quad (\text{B3.6})$$

Gleichung (B3.5) werden wir verwenden, um die G_2 -Funktion aus der Bewegungsgleichung (B2.8), die wir in die Form

$$-\{S(1,3)+W(1,3)\}G(3,2)+iV(14,35)G(35,24)=\delta(1,2) \quad (\text{B3.7})$$

mit dem Schrödinger Operator

$$S(1,3) := -\{(i\frac{\delta}{\delta t_\alpha} + \mu)\delta_{\alpha\gamma} - t_{\alpha\gamma}\}\delta(t_\alpha - t_\gamma) \quad (\text{B3.8})$$

umschreiben, zu eliminieren: Wir definieren ein effektives Einteilchenpotential (Massenoperator) Σ durch die Dyson-Gleichung

$$-\{S(1,3)+W(1,3)+\Sigma(1,3)\}G(3,2) = \delta(1,2) \quad (\text{B3.9})$$

und leiten daraus durch Differenzieren eine weitere Beziehung für $\frac{\delta G}{\delta W}$ ab, nämlich

$$\frac{\delta G}{\delta W}(14,23) = G(1,3)G(4,2) + G(1,5)\frac{\delta \Sigma(5,6)}{\delta W(3,4)}G(6,2) \quad (B3.10)$$

oder kurz

$$\frac{\delta G}{\delta W} = L^0 + L^0 \cdot \frac{\delta \Sigma}{\delta W} \quad (B3.11)$$

Aus (B3.5), (B3.7), (B3.9) und (B3.10) erhält man nach einigen Zwischenschritten eine Gleichung für Σ , die als Ausgangspunkt für Näherungslösungen dienen kann:

$$\Sigma(1,2) = -i\{2V(13,24)G(4,3) - V(13,56)G(5,7)\frac{\delta \Sigma}{\delta W}(76,23)\} \quad (B3.12)$$

Iteration dieser Gleichung zeigt, dass Σ von der Störung W nur über die G_1 -Funktion abhängt, was die Einführung eines effektiven Zweiteilchenpotentials K durch die Gleichung

$$\frac{\delta \Sigma}{\delta W} = \frac{\delta \Sigma}{\delta G} \cdot \frac{\delta G}{\delta W} = -iK \cdot \frac{\delta G}{\delta W} \quad (B3.13)$$

nahelegt. Die Ableitung $\frac{\delta G}{\delta W}$ lässt sich eliminieren durch Einführung einer T-Matrix

$$T = K - iK \cdot L^0 \cdot T \quad (B3.14)$$

Nach rechtsseitiger Multiplikation von (B3.14) mit L^0 , linksseitiger Multiplikation von (B3.11) mit K und Vergleich ergibt sich die Relation

$$\frac{\delta \Sigma}{\delta W} = -iT \cdot L^0 \quad (B3.15)$$

Mit (B3.5), (B3.10) und (B3.15) folgt eine Gleichung für die

G_2 -Funktion

$$G(12,34) = L^0(12,43) - L^0(12,34) + iL^0(15,36) \cdot T(67,58)L^0(82,74) \quad (B3.16)$$

aus der man (etwa durch Vergleich mit den zugehörigen Graphen) abliest, dass T der korrelierte amputierte Teil von G_2 ist. Vernachlässigung aller Korrelationen (Hartree-Fock-Näherung) ergibt beispielsweise die Gleichungen:

$$\begin{aligned} \Sigma(1,2) &= -2iV(13,24)G(4,3) \\ G(12,34) &= L^0(12,43) - L^0(12,34) \\ K(12,34) &= 2V(12,34) \end{aligned} \quad (B3.17)$$

woraus u.a. folgt, dass Σ wegen der Homogenität der Zeit nicht von der Variablen $t = t_{\alpha 1} - t_{\alpha 2}$ abhängt; die Fouriertransformierte ist also nicht energieabhängig. Höhere Näherungen lassen sich ebenso mit Hilfe der T-Matrix klassifizieren. Durch Differentiation von (B3.12) nach $G(3,4)$ erhält man eine weitere K und T verknüpfende Gleichung:

$$\begin{aligned} K(12,34) &= 2V(12,34) + iV(12,56)L^0(56,78)T(87,34) \\ &+ iV(15,46)L^0(67,58)T(28,37) \\ &+ iV(15,64)L^0(67,58)T(82,37) \\ &+ iV(15,68)L^0(68,79)\frac{\delta T(97,310)}{\delta G(4,2)}G(10,5) \end{aligned} \quad (B3.18)$$

Setzen wir diesen Ausdruck in die Definition (B3.14) der T-Matrix ein, so folgt eine Gleichung für T, in der nur noch G_1 und $\frac{\delta T}{\delta G_1}$ auftreten, während W, V und K völlig eliminiert sind. In linearer Näherung und unter Vernachlässigung von $\frac{\delta T}{\delta G_1}$

ist dann

$$\begin{aligned} T(12,34) = & 2V(12,34) + iV(12,56)L^0(56,78)T(87,34) \\ & - 2iV(15,36)L^0(67,58)T(82,74) \\ & + iV(15,46)L^0(67,58)T(28,37) \\ & + iV(15,64)L^0(67,58)T(82,37) \end{aligned} \quad (B3.19)$$

Der zweite Summand auf der rechten Seite dieser Gleichung entspricht einer Summe über Leitergraphen, der dritte einer Summe über Blasengraphen und die beiden letzten Summanden entsprechen den Austauschtermen der Blasennäherung.

Ebenso erhält man durch Einsetzen von (B3.14) in (B3.18), Linearisierung und Vernachlässigung von $\frac{\delta T}{\delta G_1}$ eine Gleichung für K:

$$\begin{aligned} K(12,34) = & 2V(12,34) + iV(12,56)L^0(56,78)K(87,34) \\ & + iV(15,46)L^0(67,58)K(28,37) \\ & + iV(15,64)L^0(67,58)K(82,37) \end{aligned} \quad (B3.20)$$

Wie man sieht, unterscheiden sich die Gleichungen für K und T nur um den Blasenterm; sie stimmen also insbesondere in der Leiternäherung überein.

Für spätere Rechnungen sei noch die aus (B3.10) und (B3.13) folgende Bethe-Salpeter-Gleichung

$$L = L^0 - iL^0 \cdot K \cdot L \quad (B3.21)$$

angegeben, die wegen (B3.14) auch

$$L = L^0 - iL^0 \cdot T \cdot L^0 \quad (B3.22)$$

geschrieben werden kann.

4. Eigenschaften der G_1 -Funktion (Pu 61, Re 63, Fe 65, We 67)

Wir betrachten verschiedene formale Darstellungen und in der Kernphysik wichtige Näherungen zur G_1 -Funktion. Eine ausführlichere Diskussion dieser und weiterer wichtiger Eigenschaften von G_1 findet man in der umfassenden Literatur über dieses Gebiet.

Aus der Definition (B2.7) mit (B2.1) liest man ab, dass $G(1,2)$ an der Stelle $t_{\alpha 1} = t_{\alpha 2}$ eine Unstetigkeit besitzt, die am besten durch eine Zerlegung

$$G(1,2) = \check{G}(1,2) \cdot \theta(t_{\alpha 1} - t_{\alpha 2}) + \check{\check{G}}(1,2) \cdot \theta(t_{\alpha 2} - t_{\alpha 1}) \quad (\text{B4.1})$$

in zwei bei $t_{\alpha 1} = t_{\alpha 2}$ stetige Funktionen

$$\begin{aligned} \check{G}(1,2) &:= -i \langle a_{\alpha 1}(t_{\alpha 1}) a_{\alpha 2}^+(t_{\alpha 2}) \rangle \\ \check{\check{G}}(1,2) &:= i \langle a_{\alpha 2}^+(t_{\alpha 2}) a_{\alpha 1}(t_{\alpha 1}) \rangle \end{aligned} \quad (\text{B4.2})$$

erfasst wird. Wegen der Homogenität der Zeit hängen G , $\check{G}$ und $\check{\check{G}}$ nur von der Differenz

$$t := t_{\alpha 1} - t_{\alpha 2} \quad (\text{B4.3})$$

ab. Das Verhalten von $\check{G}(t)$ und $\check{\check{G}}(t)$ lässt sich besonders einfach beschreiben, wenn beide Funktionen analytisch in die komplexe t -Ebene fortgesetzt werden, wobei die Forderung, dass keine exponentiell anwachsenden Terme auftreten sollen,

die Definitionsbereiche $D(\tilde{G})$ beschränkt:

$$\begin{aligned} D(\tilde{G}_{\alpha\beta}) &= \{t \mid \operatorname{Im} \tau \leq \operatorname{Im} t \leq 0\} \\ D(\check{G}_{\alpha\beta}) &= \{t \mid 0 \leq \operatorname{Im} t \leq -\operatorname{Im} \tau\} \end{aligned} \quad (\text{B4.4})$$

Wie früher wurde $\operatorname{Im} \tau \leq 0$ vorausgesetzt. Jetzt folgt aus der Bewegungsgleichung (B2.4) und wegen $\operatorname{Sp}(BA) = \operatorname{Sp}(AB)$ eine $\tilde{G}$ und $\check{G}$ verknüpfende Relation

$$\tilde{G}_{\alpha\beta}(t) = -\check{G}_{\alpha\beta}(t-\tau) \quad , \quad t \in D(\tilde{G}_{\alpha\beta}) \quad (\text{B4.5})$$

die nach Übergang zu den Fouriertransformierten (siehe Anhang A) die Form

$$\tilde{G}_{\alpha\beta}(\omega) = -e^{i\omega\tau} \check{G}_{\alpha\beta}(\omega) \quad (\text{B4.6})$$

annimmt. Dieser Zusammenhang lässt sich mit Hilfe einer Spektralfunktion $g_{\alpha\beta}(\omega)$ identisch erfüllen durch

$$\tilde{G}_{\alpha\beta}(\omega) = -i \frac{g_{\alpha\beta}(\omega)}{1+e^{-i\omega\tau}} \quad , \quad \check{G}_{\alpha\beta}(\omega) = i \frac{g_{\alpha\beta}(\omega)}{1+e^{+i\omega\tau}} \quad (\text{B4.7})$$

und daraus folgt

$$g_{\alpha\beta}(\omega) = i\{\tilde{G}_{\alpha\beta}(\omega) - \check{G}_{\alpha\beta}(\omega)\} \quad (\text{B4.8})$$

Die angegebenen Gleichungen kann man mit Methoden der Funktione theorie in grosser Allgemeinheit weiter behandeln (Pu 61, Re 63). Wir wollen hier die Form der Spektralfunktion im limes $i\tau \rightarrow \infty$, also für Grundzustandserwartungswerte, etwas genauer betrachten. Zunächst erhält man aus (B4.8) und der Bewegungsgleichung (B2.4) nach Fouriertransformation ganz allgemein

$$g_{\alpha\beta}(\omega) = 2\pi\{\langle a_{\alpha} \delta(\omega - H) a_{\beta}^{\dagger} \rangle + \langle a_{\beta}^{\dagger} \delta(\omega + H) a_{\alpha} \rangle\} \quad (\text{B4.9})$$

mit dem Operator

$$\mathcal{H} := \mathcal{H} - (E_0(A) - \mu A) \quad (\text{B4.10})$$

Diese Gleichung schreiben wir um in die äquivalente Form

$$\begin{aligned} g_{\alpha\beta}(\omega) = & \\ & 2\pi \{ \sum_n \langle \psi_A^0 | a_\alpha | \psi_{A+1}^n \rangle \langle \psi_{A+1}^n | a_\beta^+ | \psi_A^0 \rangle \delta(\omega - (E_n(A+1) - E_0(A) - \mu)) \\ & + \sum_l \langle \psi_A^0 | a_\beta^+ | \psi_{A-1}^l \rangle \langle \psi_{A-1}^l | a_\alpha | \psi_A^0 \rangle \delta(\omega - (E_0(A) - E_l(A-1) - \mu)) \} \end{aligned} \quad (\text{B4.11})$$

Summiert wird über ein vollständiges System von Zwischenzuständen $|\psi_{A+1}^n\rangle \in \mathcal{H}_{\{A+1\}}$ und $|\psi_{A-1}^l\rangle \in \mathcal{H}_{\{A-1\}}$. Man liest ab, dass die Singularitäten von $g_{\alpha\beta}(\omega)$ für das A-Teilchen-System durch die Differenzen

$$\omega_{A+1}^n := E_n(A+1) - E_0(A) - \mu \quad (\text{B4.12})$$

und

$$\omega_{A-1}^l := E_0(A) - E_l(A-1) - \mu \quad (\text{B4.13})$$

von Eigenwerten des Hamilton-Operators $\mathcal{H}$ für das (A+1)- bzw. (A-1)-Teilchen Systems bestimmt sind und mit den Einteilchenstärken

$$\begin{aligned} z_{\alpha\beta}^n &:= \langle \psi_A^0 | a_\alpha | \psi_{A+1}^n \rangle \langle \psi_{A+1}^n | a_\beta^+ | \psi_A^0 \rangle \\ z_{\alpha\beta}^l &:= \langle \psi_A^0 | a_\beta^+ | \psi_{A-1}^l \rangle \langle \psi_{A-1}^l | a_\alpha | \psi_A^0 \rangle \end{aligned} \quad (\text{B4.14})$$

auftreten. Die Diagonalelemente $z_{\alpha\alpha}^n$ lassen eine einfache Deutung zu: Sie geben den Überlapp zwischen dem Eigenzustand $|\psi_{A+1}^n\rangle$ des Hamiltonoperators und dem durch Hinzufügen eines Teilchens zum Grundzustand des A-Teilchen-Systems entstehenden Zustand $a_\alpha^+ |\psi_A^0\rangle$ an. Alle diagonalen Einteilchenstärken liegen zwischen Null und Eins.

Die so gewonnene Darstellung der Spektralfunktion und die analog abgeleitete Gleichung für die Fouriertransformierte $G(\omega)$ der vollständigen G_1 -Funktion

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = \langle a_{\alpha} \frac{1}{\omega - H + i0} a_{\beta}^{\dagger} \rangle + \langle a_{\beta}^{\dagger} \frac{1}{\omega + H - i0} a_{\alpha} \rangle \quad (B4.15)$$

bezw.

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = \left\{ \sum_n \frac{z_{\alpha\beta}^n}{n\omega - \omega_{A+1}^n + i0} + \sum_l \frac{z_{\alpha\beta}^l}{\omega - \omega_{A-1}^l - i0} \right\} \quad (B4.16)$$

sind im allgemeinen nur für formale Aussagen geeignet, da sie für die Lösung des A -Teilchen-Problems eine Kenntnis der vollständigen Lösung des $(A+1)$ -Teilchen-Problems voraussetzen.

Empirisch ist bekannt, dass bei sehr vielen physikalischen Systemen, insbesondere auch bei Atomkernen, nur sehr wenige Einteilchenstärken wesentlich von Null verschieden sind, wie der Erfolg typischer Einteilchenmodelle zeigt.

Für den Spezialfall eines reinen Einteilchenmodells (Schalenmodell der Atomkerne, Hartree-Fock-Theorie) lassen sich die angegebenen Formeln noch stark vereinfachen: Das System stellt ein ideales Fermigas am absoluten Nullpunkt dar, weshalb dynamische Korrelationen vernachlässigbar und die Eigenzustände des Hamiltonoperators durch Slaterdeterminanten gegeben sind.

Die $z_{\alpha\beta}^{\nu,\lambda}$ sind dann diagonal und nur für einen einzigen Wert ν bzw. λ von Null verschieden und exakt gleich Eins. Nach Einführung der Besetzungszahlen $n_{\alpha} = 0,1$ für den Zustand α ergibt sich

$$g_{\alpha\beta}^S(\omega) = \delta_{\alpha\beta} 2\pi \{ (1-n_{\alpha}) \delta(\omega - \omega_{A+1}^{\alpha}) + n_{\alpha} \delta(\omega - \omega_{A-1}^{\alpha}) \} \quad (B4.17)$$

$$G_{\alpha\beta}^S(\omega) = \delta_{\alpha\beta} \left\{ \frac{(1-n_{\alpha})}{\omega - \omega_{A+1}^{\alpha} + i0} + \frac{n_{\alpha}}{\omega - \omega_{A-1}^{\alpha} - i0} \right\} \quad (B4.18)$$

Zuletzt suchen wir eine genäherte Form der Spektralfunktion, die gewissermassen die Mittelposition zwischen der allgemeinen Form (B4.11) und dem Einteilchen-Spezialfall (B4.17) einnimmt.

Wir gehen aus von der Bemerkung, dass die Fouriertransformierte $G(\omega)$ der vollen G_1 -Funktion wegen

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{1 + e^{\pm i\omega\tau}} = \theta(\mp\omega) \quad (\text{B4.19})$$

die Darstellung

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_{-\infty}^0 d\omega' \frac{g_{\alpha\beta}(\omega')}{\omega - \omega' - i0} + \int_0^{\infty} d\omega' \frac{g_{\alpha\beta}(\omega')}{\omega - \omega' + i0} \right\} \quad (\text{B4.20})$$

besitzt. Das legt die Definition einer für komplexe Werte ζ definierten Funktion

$$\hat{G}_{\alpha\beta}(\zeta) := \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{g_{\alpha\beta}(\omega')}{\zeta - \omega'} \quad (\text{B4.21})$$

nahe, welche bis auf den Schnitt an der reellen Achse in der ganzen ζ -Ebene analytisch ist. Wegen

$$\frac{1}{x \pm i0} = \frac{P}{x} \mp i\pi\delta(x) \quad (\text{B4.22})$$

folgt aus der Definition von $\hat{G}$ sofort

$$\hat{G}_{\alpha\beta}(\omega + i0) = \hat{G}_{\alpha\beta}^*(\omega - i0) \quad (\text{B4.23})$$

sowie eine Relation mit der Spektralfunktion

$$g_{\alpha\beta}(\omega) = i\{\hat{G}_{\alpha\beta}(\omega + i0) - \hat{G}_{\alpha\beta}(\omega - i0)\} \quad (\text{B4.24})$$

Die Dyson-Gleichung (B3.9) geht nach Fouriertransformation* und analytischer Fortsetzung $T(\omega) \rightarrow \hat{T}(\zeta)$, $\Sigma(\omega) \rightarrow \hat{\Sigma}(\zeta)$ in

$$\sum_{\gamma} \{ (\zeta + \mu) \delta_{\alpha\gamma} - (\hat{T}_{\alpha\gamma}(\zeta) + \hat{\Sigma}_{\alpha\gamma}(\zeta)) \} \hat{G}_{\gamma\beta}(\zeta) = \delta_{\alpha\beta} \quad (\text{B4.25})$$

über. Nimmt man in Analogie zu einem Einteilchenmodell nun an, dass die Basis α so gewählt werden kann, dass die G_1 -Funktion sowie alle Einteilchenmatrixelemente in etwa diagonal sind,

$$Q_{\alpha\beta}^{(1)}(\zeta) \approx \delta_{\alpha\beta} Q_{\alpha}^{(1)}(\zeta) \quad (\text{B4.26})$$

so ist

$$\hat{G}_{\alpha}(\zeta) = \frac{1}{\zeta + \mu - \hat{T}_{\alpha}(\zeta) - \hat{\Sigma}_{\alpha}(\zeta)} \quad (\text{B4.27})$$

eine Näherungslösung des Problems. Wegen (B4.24) ist auch die Spektralfunktion $g_{\alpha\beta}(\omega)$ in etwa diagonal und kann zudem nur in der Nähe solcher Werte ω_{α} von ω ungleich Null sein, für die der Nenner in der obigen Gleichung verschwindet

$$\omega_{\alpha} + \mu - \text{Re}\{\hat{T}_{\alpha}(\omega_{\alpha}) + \hat{\Sigma}_{\alpha}(\omega_{\alpha})\} = 0, \quad (\text{B4.28})$$

was die ω_{α} und damit die Einteilchenenergien

$$\varepsilon_{\alpha} := \omega_{\alpha} + \mu \quad (\text{B4.29})$$

definiert.

Wenn wir (B4.23) beachten und den Nenner in (B4.27) um ω_{α} nach Taylor entwickeln, erhalten wir für die uns interessierenden

*Wegen (B3.8) sind T und somit $\hat{T}$ vom Energieargument unabhängig. Aus Symmetriegründen geben wir dieses dennoch explizit an.

Fälle

$$(\omega \pm i0 + \mu - \hat{T}_\alpha(\omega \pm i0) - \hat{\Sigma}_\alpha(\omega \pm i0)) = \frac{1}{z_\alpha} \{ (\omega - \omega_\alpha) \pm (\frac{\sigma_\alpha}{2} + 0)i \} \quad (B4.30)$$

mit

$$z_\alpha := \{ 1 - \frac{d}{d\omega} \text{Re}(\hat{T}_\alpha(\omega) + \hat{\Sigma}_\alpha(\omega)) \Big|_{\omega=\omega_\alpha} \}^{-1} \quad (B4.31)$$

und

$$\sigma_\alpha := 2z_\alpha \text{Im}(\hat{T}_\alpha(\omega - i0) + \hat{\Sigma}_\alpha(\omega - i0)) \Big|_{\omega=\omega_\alpha} \quad (B4.32)$$

Damit gilt nach (B4.24) und (B4.28)

$$g_{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} z_\alpha \frac{\sigma_\alpha}{(\omega + \mu - \text{Re}(\hat{T}_\alpha(\omega_\alpha) + \hat{\Sigma}_\alpha(\omega_\alpha)))^2 + \sigma_\alpha^2/4} \quad (B4.33)$$

Aus den gemachten Voraussetzungen folgt also eine lorentzähnliche Glockenkurve der Breite σ_α für $g(\omega)$, wobei das Maximum etwa bei $\omega = \omega_\alpha$ liegt. Es kann gezeigt werden (Pu 61), dass

$$\frac{d}{d\omega} \text{Re}\{\hat{T}_\alpha(\omega) + \hat{\Sigma}_\alpha(\omega)\} \Big|_{\omega=\omega_\alpha} \neq 0 \quad (B4.34)$$

und deshalb gilt für den Renormierungsfaktor z_α

$$0 < z_\alpha \leq 1 \quad (B4.35)$$

Verschiedene Untersuchungen (Ga 58, Lu 60a, Lu 60b, No 62) weisen darauf hin, dass ganz allgemein für Fermisysteme der Fermienergie ϵ_F die Relation

$$\sigma_\alpha \sim (\epsilon_\alpha - \epsilon_F)^2 \quad (B4.36)$$

gilt, sodass Anregungen in der Nähe der Fermikante quasistabil sind. Für verschwindende Breiten erhält man

$$g_{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} z_\alpha 2\pi \delta(\omega - \omega_\alpha) = \delta_{\alpha\beta} z_\alpha 2\pi \delta(\omega + \mu - \epsilon_\alpha) \quad (B4.37)$$

was der in (B4.17) abgeleiteten Form ähnlich ist. Beide Gleichungen unterscheiden sich durch den Renormierungsfaktor z_α und in den Energieargumenten; während aber (B4.17) für eine beliebige Basis $|\alpha\rangle$ galt, ist diese jetzt durch die Forderung eingeschränkt, dass $\hat{G}$ und $(\hat{T}+\hat{\Sigma})$ in ihr näherungsweise diagonal sind. Im Sinne unserer Annahmen setzen wir die G_1 -Funktion in der Form

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} z_\alpha \left\{ \frac{(1-n_\alpha)}{\omega+\mu-\epsilon_\alpha+i0} + \frac{n_\alpha}{\omega+\mu-\epsilon_\alpha-i0} \right\} + \tilde{G}_{\alpha\beta}(\omega) \quad (\text{B4.38})$$

an. Die bei den Polen $(\epsilon_\alpha - \mu)$ von G reguläre Funktion $\tilde{G}$ gibt den Untergrund der Resonanz an, der Renormierungsfaktor berücksichtigt die dadurch sich ergebende Verminderung der Einteilchenstärke. In einem konsistenten Modell sollten die Einteilchenenergien nach (B4.28) und (B4.29) berechnet werden; wenn wir uns auf solche Kerne der Massenzahl A (magische Kerne) beschränken, für die das $(A+1)$ -System gut im Teilchen- bzw. Lochbild beschrieben wird, können wir sie wegen (B4.12) näherungsweise mit den Differenzen der experimentellen Energien identifizieren:

$$\epsilon_\alpha \approx E_\alpha^{\text{exp}}(A\pm 1) - E_0(A) \quad (\text{B4.39})$$

Die Form (B4.38) von $G_{\alpha\beta}(\omega)$ wird als Quasiteilchennäherung für die G_1 -Funktion bezeichnet: Die Gleichung besagt ja gerade, dass die in der Nähe der Fermikante liegenden A -Teilchen-Eigenzustände von H im wesentlichen als Einteilchenanregungen der Energie ϵ_α beschrieben werden können.

5. Eigenschaften spezieller G_2 -Funktionen

Im vorigen Abschnitt dieser Arbeit wurde erläutert, welche weitreichenden Konsequenzen die Unstetigkeit der G_1 -Funktionen bei $t = t_{\alpha 1} - t_{\alpha 2} = 0$ hat und wie man diese Unstetigkeit methodisch erfasst. Für G_2 -Funktionen, die von effektiv drei Zeitargumenten abhängen, ist natürlich ein bedeutend schwieriger zu behandelndes Verhalten zu erwarten. Wir wollen zeigen, dass wesentliche Systemeigenschaften schon aus der in (B2.13) definierten Antwortfunktion R -also einer speziellen G_2 -Funktion- ableitbar sind. Ausserdem wird klar werden, warum R als Antwortfunktion bezeichnet wird.

a) Formales

Aus der Definition von R sieht man, dass diese Funktion in Abhängigkeit vom Zeitargument $t = t_{\alpha 1} - t_{\alpha 2}$ das gleiche Verhalten -bis auf den wegfallenden Vorzeichenwechsel im T-Produkt- zeigt wie G_1 , sodass dieselben Methoden angewandt werden können. Wir betrachten wieder den Grenzfall $i\tau \rightarrow \infty$. Für die Fouriertransformierte ergibt sich in völliger Analogie zu (B4.15)

$$R_{\alpha 1 \alpha 2, \beta 1 \beta 2}(\omega) = \frac{1}{i} \{ \langle a_{\beta 1}^+ a_{\alpha 1} \frac{1}{\omega - H + i0} a_{\beta 2}^+ a_{\alpha 2} \rangle - \langle a_{\beta 2}^+ a_{\alpha 2} \frac{1}{\omega + H - i0} a_{\beta 1}^+ a_{\alpha 1} \rangle \} \quad (B5.1)$$

Der Operator H wurde in (B4.10) definiert. Wir schreiben diese Gleichung in der äquivalenten Form

$$R_{\alpha 1 \alpha 2, \beta 1 \beta 2}(\omega) = \frac{1}{i} \sum_k \left\{ \frac{\langle \psi_A^0 | a_{\beta 1}^+ a_{\alpha 1} | \psi_A^k \rangle \langle \psi_A^k | a_{\beta 2}^+ a_{\alpha 2} | \psi_A^0 \rangle}{\omega - \{E_k(A) - E_0(A)\} + i0} - \frac{\langle \psi_A^0 | a_{\beta 2}^+ a_{\alpha 2} | \psi_A^k \rangle \langle \psi_A^k | a_{\beta 1}^+ a_{\alpha 1} | \psi_A^0 \rangle}{\omega + \{E_k(A) - E_0(A)\} - i0} \right\} \quad (B5.2)$$

Diesmal wird über ein vollständiges System von Zwischenzuständen $|\psi_A^k\rangle \in \mathcal{H}_{\{A\}}$ summiert. Man liest ab, dass die Singularitäten von R für das A-Teilchen-System durch die Anregungsenergien

$$\omega_A^k := E_k(A) - E_0(A) \quad (B5.3)$$

d.h. Differenzen von Eigenwerten des Hamiltonoperators H für das A-Teilchen-System, bestimmt werden und mit den Stärken

$$z_{\alpha 1 \alpha 2, \beta 1 \beta 2}^k := \rho_{\alpha 1 \beta 1}^k \cdot \rho_{\beta 2 \alpha 2}^{k*} \text{ bzw. } z_{\alpha 1 \alpha 2, \beta 1 \beta 2}^{k*} \quad (B5.4)$$

auftreten. Die speziellen Matrixelemente $\rho_{\alpha\beta}^k$ des Dichteoperators sind durch

$$\rho_{\alpha\beta}^k := \langle \psi_A^0 | \rho_{\alpha\beta} | \psi_A^k \rangle = \frac{1}{i} \langle \psi_A^0 | a_{\beta}^+ a_{\alpha} | \psi_A^k \rangle \quad (B5.5)$$

definiert; das Betragsquadrat von $\rho_{\alpha\beta}^k$ kann man als Übereinstimmungswahrscheinlichkeit zwischen einem angeregten Zustand $|\psi_A^k\rangle$ des A-Teilchen-Systems und einer Teilchen-Loch-Anregung $a_{\beta}^+ a_{\alpha} | \psi_A^0 \rangle$ deuten.

Für den Spezialfall eines Einteilchenmodells vereinfachen sich die Formeln wieder sehr: Grundzustand und angeregte Zustände sind Slaterdeterminanten der Form

$$|\psi_A^0\rangle = a_{vA}^+ \dots a_{v1}^+ | \rangle \quad (B5.6)$$

$$\text{und } |\psi_A^k\rangle = a_{v\sigma}^+ a_{v\nu} a_{vA}^+ \dots a_{v1}^+ | \rangle \quad (B5.7)$$

sodass $k = (\sigma, \nu)$. Durch Auswerten von Kommutatoren folgt

dann für die Matrixelemente $\rho_{\alpha\beta}^{(\sigma,\nu)}$ die Gleichung

$$\rho_{\alpha\beta}^{(\sigma,\nu)} = \delta_{\alpha\sigma} \delta_{\beta\nu} \cdot \frac{1}{i} \quad (B5.8)$$

und daraus erhält man nach (B5.2)

$$R_{\alpha_1\alpha_2,\beta_1\beta_2}^S(\omega) = \frac{1}{i} \delta_{\alpha_1\beta_2} \delta_{\alpha_2\beta_1} \cdot \left\{ \frac{(1-n_{\alpha_1})n_{\beta_1}}{\omega - \{E_{(\sigma,\nu)}(A) - E_O(A)\} + i0} - \frac{(1-n_{\beta_1})n_{\alpha_1}}{\omega - \{E_{(\sigma,\nu)}(A) - E_O(A)\} - i0} \right\} \quad (B5.9)$$

Die Zähler bewirken, dass nur Teilchen-Loch-Anregungen nicht-verschwindende Beiträge zu R^S liefern.

Ein weiterer einfacher Spezialfall von (B5.2) ergibt sich für $\omega \approx \omega_A^k$. Dann trägt im wesentlichen nur ein Summand zur Summe bei und es ist

$$R_{\alpha_1\alpha_2,\beta_1\beta_2}^S(\omega) \Big|_{\omega \approx \omega_A^k} \approx \frac{1}{i} \cdot \frac{\rho_{\alpha_1\beta_1}^k \cdot \rho_{\beta_2\alpha_2}^{k*}}{\omega - \omega_A^k + i0} \quad (B5.10)$$

b) Lineare Antwortfunktion

Um zu zeigen, dass R eng mit der Reaktion des Systems auf eine äussere Störung W zusammenhängt, schreiben wir (B3.5) und (B3.6) für spezielle Zeitargumente nochmals auf:

$$L_{\alpha_1\alpha_2,\beta_1\beta_2}(t_{\alpha_1}t_{\alpha_2}, t_{\alpha_1}t_{\alpha_2}) = -G_{\alpha_1\alpha_2,\beta_1\beta_2}(t_{\alpha_1}t_{\alpha_2}, t_{\alpha_1}t_{\alpha_2}) + G_{\alpha_1\beta_1}(t_{\alpha_1}t_{\alpha_1}) \cdot G_{\alpha_2\beta_2}(t_{\alpha_2}t_{\alpha_2}) \quad (B5.11)$$

Wegen der Homogenität der Zeit ist das Produkt der beiden G_1 -Funktionen zeitlich konstant. Mit den Definitionen (B2.11) und (B2.13) erhält man für die Fouriertransformierten bezüglich $t = t_\alpha - t_\beta$

$$L_{\alpha_1\alpha_2,\beta_1\beta_2}(\omega) = -R_{\alpha_1\alpha_2,\beta_1\beta_2}(\omega) + 2\pi\delta(\omega)\rho_{\alpha_1\beta_1}\rho_{\alpha_2\beta_2} \quad (\text{B5.12})$$

Für $\omega \neq 0$ stimmen also $R(\omega)$ und $L(\omega)$ bis auf das Vorzeichen überein. Die Änderung $\Delta_W \langle Q \rangle$ eines beliebigen Einteilchenoperators Q durch Hinzufügen der Störung W zum Hamiltonoperator ist

$$\Delta_W \langle Q \rangle = \langle Q \rangle_W - \langle Q \rangle_{W=0} = i \sum_{\alpha\beta} q_{\beta\alpha} \{ \rho_{\alpha\beta}^W - \rho_{\alpha\beta}^{W=0} \} \quad (\text{B5.13})$$

und für die Differenz der Dichtematrizen erhält man wegen (B3.6) und

$$G^W(1,2) \approx G^{W=0}(1,2) + \left. \frac{\delta G(1,2)}{\delta W(3,4)} \right|_{W=0} \cdot W(3,4) \quad (\text{B5.14})$$

die Gleichung

$$\rho_{\alpha\beta}^W - \rho_{\alpha\beta}^{W=0} = \sum_{\gamma\delta} \int dt_\gamma L_{\alpha\delta,\beta\gamma}^{(t_\alpha t_\gamma, t_\alpha t_\gamma)} w_{\gamma\delta} \quad (\text{B5.15})$$

in der L nur mit den speziellen Zeitargumenten von (B5.11) vorkommt. Die Fouriertransformierte $L(\omega)$ und somit auch $R(\omega)$ beschreiben also die Änderung von $\langle Q \rangle$ durch W in linearer Ordnung. Sie werden ohne Unterscheidung als (lineare) Antwortfunktion, "(linear) response function", bezeichnet.

c) Gleichungen für die Antwortfunktion: (Br 65)

Nachdem gezeigt wurde, dass $R(\omega)$ mit den Anregungsenergien eines A-Teilchen-Systems und speziellen Matrixelementen des Dichteoperators eng verknüpft ist, wollen wir eine Gleichung ableiten, aus der sich diese Größen bestimmen lassen.

Ausgangspunkt ist Formel (B3.21), die wir nach Fouriertransformation $1=(\alpha, t_\alpha) \rightarrow \tilde{1}=(\alpha, e_\alpha)$ nochmals aufschreiben:

$$L(\tilde{1}\tilde{2}, \tilde{3}\tilde{4}) = G(\tilde{1}\tilde{4})G(\tilde{2}\tilde{3}) - iG(\tilde{1}\tilde{5})G(\tilde{6}\tilde{3})K(\tilde{5}\tilde{7}, \tilde{6}\tilde{8})L(\tilde{8}\tilde{2}, \tilde{7}\tilde{4}) \quad (B5.16)$$

Aus der Homogenität der Zeit folgt der Energiesatz für Zwei-Punkt- und Vier-Punkt-Funktionen

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(e_\alpha e_\beta) &= G_{\alpha\beta}(e_\alpha)\delta(e_\alpha - e_\beta) \\ H_{\alpha\lambda, \kappa\beta}(e_\alpha e_\lambda, e_\kappa e_\beta) &= H_{\alpha\lambda, \kappa\beta}(\epsilon, \epsilon', \omega)\delta(\omega - \omega') \end{aligned} \quad (B5.17)$$

mit den Teilchen-Loch-Variablen

$$e_\alpha = \epsilon + \omega/2, \quad e_\lambda = \epsilon' - \omega'/2, \quad e_\kappa = \epsilon - \omega/2, \quad e_\beta = \epsilon' + \omega'/2 \quad (B5.18)$$

Der Betrag der Funktionaldeterminante der Transformation $(e_\alpha e_\lambda e_\kappa e_\beta) \rightarrow (\epsilon \epsilon' \omega \omega')$ sowie der Teiltransformation $(e_\lambda e_\beta) \rightarrow (\epsilon' \omega')$ ist 1. Aus (B5.16) erhält man durch Integration über das zweite und vierte Energieargument der linken Seite mit der angegebenen Variablensubstitution die Gleichung

$$\begin{aligned} \int d\epsilon' L_{\alpha\lambda, \kappa\beta}(\epsilon, \epsilon', \omega) &= G_{\alpha\beta}(\epsilon + \omega/2)G_{\lambda\kappa}(\epsilon - \omega/2) - \\ i \sum_{\gamma\gamma'} \int d\epsilon'' &G_{\alpha\gamma}(\epsilon + \omega/2)G_{\gamma\kappa}(\epsilon - \omega/2)K_{\gamma\gamma'}(\epsilon, \epsilon'', \omega) \cdot \\ \int d\epsilon' L_{\gamma\lambda, \gamma'\beta} &(\epsilon'', \epsilon', \omega) \end{aligned} \quad (B5.19)$$

die man mit den Definitionen

$$L_{\alpha\lambda, \kappa\beta}(\epsilon, \omega) := \frac{i}{2\pi} \int d\epsilon' L_{\alpha\lambda, \kappa\beta}(\epsilon, \epsilon', \omega)$$

$$L_{\alpha\lambda, \kappa\beta}^0(\epsilon, \omega) := \frac{i}{2\pi} G_{\alpha\beta}(\epsilon + \omega/2) G_{\lambda\kappa}(\epsilon - \omega/2) \quad (B5.20)$$

auch in der Form

$$L(\epsilon, \omega) = L^0(\epsilon, \omega) - 2\pi L^0(\epsilon, \omega) \int d\epsilon' K(\epsilon, \epsilon', \omega) L(\epsilon', \omega) \quad (B5.21)$$

schreiben kann. Der Zusammenhang mit der durch (B5.11), (B5.12) definierten Funktion $L(\omega)$ wird durch

$$L_{\alpha\lambda, \kappa\beta}(\omega) = \frac{1}{i} \int d\epsilon L_{\alpha\lambda, \kappa\beta}(\epsilon, \omega) \quad (B5.22)$$

hergestellt. Eine Gleichung für die Antwortfunktion $L(\omega)$ kann aber im allgemeinen nicht einfach aus (B5.21) durch Integration über ϵ gewonnen werden, da das effektive Zweiteilchenpotential K ebenfalls von ϵ abhängt. Der physikalische Ursprung dieser Komplikation liegt in der Retardierung der Wechselwirkung, die durch Mehrfachsteuerung über verschiedene Zwischenzustände energieabhängig wird.

Falls die Quasiteilchennäherung anwendbar ist, lässt sich die Gleichung für $L(\epsilon, \omega)$ noch vereinfachen. Aus der Definition von $L^0(\epsilon, \omega)$ mit der G_1 -Funktion (B4.38) folgt die für $\omega \approx \epsilon_\alpha - \epsilon_\kappa$ gültige näherungsweise Zerlegung (siehe Anhang C)

$$L_{\alpha\lambda, \kappa\beta}^0(\epsilon, \omega) = L_{\alpha\lambda, \kappa\beta}^s(\epsilon, \omega) + L_{\alpha\lambda, \kappa\beta}^1(\epsilon, \omega) \quad (B5.23)$$

$$\text{mit } L_{\alpha\lambda, \kappa\beta}^s(\epsilon, \omega) = z_\alpha z_\kappa \delta\left(\frac{\epsilon_\alpha + \epsilon_\kappa}{2} - \epsilon - \mu\right) L_{\alpha\lambda, \kappa\beta}^s(\omega) \quad (B5.24)$$

$$\text{und } L_{\alpha\lambda, \kappa\beta}^s(\omega) := -\delta_{\alpha\beta} \delta_{\kappa\lambda} \left\{ \frac{(1-n_\alpha)n_\kappa}{\omega - \epsilon_\alpha + \epsilon_\kappa + i0} - \frac{(1-n_\kappa)n_\alpha}{\omega - \epsilon_\alpha + \epsilon_\kappa - i0} \right\} \quad (B5.25)$$

in der $L^1(\epsilon, \omega)$ die langsam variierenden Anteile von $L^0(\epsilon, \omega)$ zusammenfasst. $L^S(\omega)$ besitzt grosse formale Ähnlichkeit mit $R^S(\omega)$ in (B5.9), stellt also die Einteilchen-Anteile von $L^0(\epsilon, \omega)$ dar, und nimmt für $\omega \neq \epsilon_\alpha - \epsilon_\kappa$ die Form

$$L_{\alpha\lambda, \kappa\beta}^S(\omega) = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\kappa\lambda} \frac{n_\kappa - n_\alpha}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\kappa - \omega} \quad (\text{B5.26})$$

an.

Luttinger und Nozières (No 62) geben ein Verfahren an, das es erlaubt, sowohl die Retardierungseffekte als auch den regulären Anteil L^1 von L^0 als auch das explizite Auftreten von z -Faktoren aus (B5.21) und den daraus folgenden Gleichungen zu eliminieren. Die Rechnungen sind recht aufwendig, weshalb wir nur die Ergebnisse zitieren: Durch Iteration sieht man sofort, dass für $L^1 = 0$ in (B5.21)

$$K_{\alpha\lambda, \kappa\beta}(\epsilon, \epsilon', \omega) = K_{\alpha\lambda, \kappa\beta}(\frac{\epsilon_\alpha + \epsilon_\kappa}{2} - \mu, \frac{\epsilon_\beta + \epsilon_\lambda}{2} - \mu, \omega) \quad (\text{B5.27})$$

gesetzt werden kann, woraus die gesuchte Gleichung für $L(\omega)$ durch Integration folgt. Entscheidend ist nun, dass nicht-verschwindende reguläre Anteile L^1 von L^0 durch eine Renormierung der K -Matrix

$$K_{\alpha\lambda, \kappa\beta}(\epsilon, \epsilon', \omega) \rightarrow \quad (\text{B5.28})$$

$$\tilde{K}_{\alpha\lambda, \kappa\beta}(\frac{\epsilon_\alpha + \epsilon_\kappa}{2} - \mu, \frac{\epsilon_\beta + \epsilon_\lambda}{2} - \mu, \omega) := F_{\alpha\lambda, \kappa\beta}(\omega) / (2\pi z_\alpha z_\kappa)$$

mit

$$\tilde{K}(\epsilon, \epsilon', \omega) := (E + 2\pi K(\epsilon, \epsilon', \omega) \int d\epsilon'' L^1(\epsilon'', \omega))^{-1} \cdot K(\epsilon, \epsilon', \omega) \quad (\text{B5.29})$$

berücksichtigt werden, wenn man sich auf Vorgänge in der Nähe der Fermikante beschränkt. Für den etwas einfacheren Fall der T-Matrix-Gleichung wird ein analoges Ergebnis auch in (La 56-58, Br 65) abgeleitet.

Die sich so aus (B5.21) durch Integration über ω ergebende Gleichung für die Antwortfunktion schreiben wir für $\omega = \omega_A^k$, also an den Polstellen von $L(\omega)$, auf. Da die G_1 -Funktionen nur Singularitäten bei den Energien des $(A-1)$ -Teilchen-Systems haben, kann der Beitrag von L^S gegenüber $L(\omega)$ vernachlässigt werden. Es ergibt sich also:

$$L_{\alpha\lambda, \kappa\beta}(\omega_A^k) = - \sum_{\substack{\gamma\gamma' \\ \nu\nu'}} L_{\alpha\nu, \kappa\gamma}^S(\omega_A^k) F_{\gamma\nu', \nu\gamma'}(\omega_A^k) L_{\gamma'\lambda, \nu'\beta}(\omega_A^k) \quad (\text{B5.30})$$

was man für $\omega_A^k \neq (\epsilon_\alpha - \epsilon_\kappa)$ nach (B5.26) auch in der Form

$$(\epsilon_\alpha - \epsilon_\kappa - \omega_A^k) L_{\alpha\lambda, \kappa\beta}(\omega_A^k) = (n_\alpha - n_\kappa) \sum_{\gamma\nu} F_{\alpha\nu, \kappa\gamma}(\omega_A^k) L_{\gamma\lambda, \nu\beta}(\omega_A^k) \quad (\text{B5.31})$$

schreiben kann. Nun benutzt man den Zusammenhang (B5.12) zwischen $L(\omega)$ und $R(\omega)$ sowie die Darstellung (B5.10) von $R(\omega)$ für $\omega = \omega_A^N$ und erhält nach Kürzen gemeinsamer Faktoren die wichtige Gleichung

$$(\epsilon_\alpha - \epsilon_\kappa - \omega_A^N) \rho_{\alpha\kappa}^N = (n_\alpha - n_\kappa) \sum_{\beta\lambda} F_{\alpha\lambda, \kappa\beta}(\omega_A^N) \rho_{\beta\lambda}^N \quad (\text{B5.32})$$

Falls die renormierte Wechselwirkung nicht von den Anregungsenergien ω_A^N des A -Teilchen-Systems abhängt, hat diese Gleichung die Form einer Matrixeigenwertgleichung für die mit dem Index N numerierten Eigenwerte ω_A^N und die zugehörigen Komponenten $\rho_{\alpha\kappa}^N$ der Eigenvektoren (die Indizes sind zu Paaren

$i = (\alpha\kappa)$, $j = (\beta\lambda)$ zusammengefasst, weshalb wir uns auf (B5.32) auch kurz als Eigenwertgleichung beziehen werden. Da $\rho_{\alpha\kappa}^N$ für $n_\alpha = n_\kappa$ verschwindet, läuft die Summation über alle Paare von Zuständen, deren einer besetzt ist, während der andere unbesetzt ist. Die Komponenten der Eigenvektoren können daher als Überlapp von Teilchen-Loch-Anregungen aus dem Grundzustand mit dem Anregungszustand N des Systems gedeutet werden. Systemanregungen starken Einteilchen-Charakters werden wir daran erkennen, dass eine Komponente des zugehörigen Eigenvektors überwiegt, während bei komplexeren Anregungen mehrere oder viele Komponenten gleicher Grössenordnung kohärent überlagert sind.

Man beachte, dass F von der Dichte und den Einteilchenenergien des Systems abhängt.

Im folgenden Abschnitt dieser Arbeit werden wir anführen, welche Näherungen bei der Beschreibung endlicher Kerne anwendbar sind, und dann zur Diskussion unseres Modells übergehen.

C. Näherungslösungen in der Kernphysik

1. Übersicht (Ki 67)

Die für Fermionensysteme angegebenen Gleichungen lassen sich nicht exakt lösen. Eine systematische Behandlung von Näherungsverfahren wird aber nur durchführbar sein, wenn es gelingt, den Gültigkeitsbereich verschiedener möglicher Näherungen mit Hilfe von dem zu beschreibenden System eigenen, mikroskopischen oder makroskopischen Ordnungsparametern abzugrenzen. Diese sollten prinzipiell aus dem zwischen den Teilchen wirkenden Potential (und eventuellen Randbedingungen) ableitbar

sein, da alle Systemeigenschaften daraus folgen. Ist die Wechselwirkung nur qualitativ bekannt oder sehr kompliziert, empfiehlt es sich, auch makroskopische Eigenschaften des Systems -wie etwa die Dichte- in Betracht zu ziehen.

Wir definieren zwei dimensionslose Grössen, den Wechselwirkungsparameter

$$\alpha := \frac{\langle V_{12} \rangle}{\langle T_{12} \rangle} \quad (C1.1)$$

als den Quotienten aus der mittleren Wechselwirkungsenergie eines Teilchenpaares und seiner mittleren kinetischen Energie, sowie den Dichteparameter

$$\eta := \frac{a}{d} \quad (C1.2)$$

als Quotienten aus der effektiven Reichweite a des Wechselwirkungspotentials und dem mittleren Teilchenabstand d . Je nachdem, ob die numerischen Werte dieser Parameter klein oder gross gegen Eins sind, spricht man von schwacher oder starker Wechselwirkung, von dünnen oder dichten Systemen.

Betrachten wir Atomkerne etwas genauer: Das kurzreichweitige Nukleon-Nukleon-Potential lässt sich auffassen als eine Überlagerung eines attraktiven Anteils der effektiven Reichweite $a_- = 2.4 \text{ F}$ und eines repulsiven Anteils mit $a_+ = 0.4 \text{ F}$. Da der mittlere Abstand zwischen zwei Nukleonen $d = 1.3 \text{ F}$ beträgt, folgt $\eta_- \approx 1.8$ und $\eta_+ \approx 0.3$, der Atomkern ist also in Bezug auf die attraktiven Kräfte ein relativ dichtes, in

Bezug auf die repulsiven Kräfte ein relativ dünnes System.

Für den Wechselwirkungsparameter errechnet man

$\alpha_- \approx 1.0$ und $\alpha_+ \approx 0.3$, sodass der anziehende Teil der Wechselwirkung als mittelstark, der abstossende Teil als relativ schwach zu klassifizieren sind. Der Quotient α_-/α_+ liegt in beiden Fällen in der Nähe von Eins.

Im Spezialfall der Coulombwechselwirkung sind α_c und η_c nicht unabhängig voneinander, sondern für homogene Systeme durch die Relation

$$\eta_c \approx \left(\frac{a_0}{d}\right)^{1/2}, \quad \alpha_c \approx \frac{d}{a_0} \quad (C1.3)$$

miteinander verknüpft. Hierin ist

$$a_0 := \frac{1}{mq^2} \quad (C1.4)$$

der Bohrsche Radius eines Teilchens der Masse m und hat für Nukleonen den Wert $a_0 = 30 \text{ F}$, sodass wir $\eta_c \approx 4.8$, $\alpha_c \approx 0.04$ erhalten: Die Protonen des Kerns stellen in Bezug auf die Coulombkraft ein dichtes System schwacher Wechselwirkung dar.

Entscheidend ist nun, dass es gelingt, die Beiträge höherer Ordnung zum effektiven Einteilchenpotential Σ , und damit die für K- und T-Matrix anzuwendenden Näherungen, mit Hilfe der Parameter α und η zu klassifizieren. Die Ergebnisse sind in übersichtlicher, tabellarischer Form in (Ki 67) angegeben und wir können daraus ablesen: Auf Systeme kurzreichweitiger Kräfte mit $\eta \ll 1$ und $\alpha/\eta \approx 1$ ist die Leiternäherung, für homogene Coulombsysteme mit $\eta \gg 1$ und $\alpha \ll 1$ die Blasennäherung anwendbar.

Wir werden in dieser Arbeit, durch den Erfolg und Abschätzungen anderer Autoren (Ga 58, Mi 64 ff) gestützt, die Leiter-näherung bei der Behandlung der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung und die Blasennäherung für die Coulombwechselwirkung der Protonen zu Grunde legen.

2. Räumlich homogene Systeme (Kernmaterie)

a) Basis und Symmetrien

Für räumlich homogene Systeme von galileiinvariant wechselwirkenden Nukleonen, deren z-Komponente des Spins s mit σ , deren c-Komponente des Isospins t mit τ bezeichnet und durch $\gamma := (\sigma, \tau)$ abgekürzt sei, sind Ort $|\vec{r}, \gamma\rangle$ bzw. Impuls $|\vec{k}, \gamma\rangle$ geeignete vollständige Basiszustände: Die Matrixelemente der betrachteten Ein- und Zwei-Teilchen-Operatoren sind in der Impulsdarstellung teildiagonal

$$\langle \vec{k}_1, \gamma_1 | Q^{(1)} | \vec{k}'_1, \gamma'_1 \rangle = \delta(\vec{k}_1 - \vec{k}'_1) Q_{\gamma_1 \gamma'_1}(\vec{k}_1) \quad (C2.1)$$

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2, \gamma_1 \gamma_2 | Q^{(2)} | \vec{k}'_1 \vec{k}'_2, \gamma'_1 \gamma'_2 \rangle = \\ \delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}'_1 - \vec{k}'_2) \langle (\vec{k}_1 - \vec{k}_2), \gamma_1 \gamma_2 | Q_{(\vec{k}_1 + \vec{k}_2)} | (\vec{k}'_1 - \vec{k}'_2), \gamma'_1 \gamma'_2 \rangle \end{aligned} \quad (C2.2)$$

und daraus folgt in der Ortsdarstellung

$$\langle \vec{r}_1, \gamma_1 | Q^{(1)} | \vec{r}'_1, \gamma'_1 \rangle = Q_{\gamma_1 \gamma'_1}^{(1)}(\vec{r}_1 - \vec{r}'_1) \quad (C2.3)$$

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2, \gamma_1 \gamma_2 | Q^{(2)} | \vec{r}'_1 \vec{r}'_2, \gamma'_1 \gamma'_2 \rangle = \\ \langle (\vec{r}_1 - \vec{r}_2), \gamma_1 \gamma_2 | Q_{(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 - \vec{r}'_1 - \vec{r}'_2)}^{(2)} | (\vec{r}'_1 - \vec{r}'_2), \gamma'_1 \gamma'_2 \rangle \end{aligned} \quad (C2.4)$$

Die Quantenzahl γ werden wir bei der Diskussion homogener Systeme unterdrücken und erst bei der Besprechung inhomogener Systeme wieder explizit angeben.

Als Kernmaterie bezeichnet man eine unendlich ausgedehnte homogene Fermiflüssigkeit ladungsfreier Nukleonen.

b. Leiternäherung (Fe 65)

Wir wollen die Leiternäherung zu (B3.20) genauer diskutieren, gehen also aus von der Gleichung

$$K^L(12,1'2') = 2V^N(12,1'2') + iV^N(12,34)L^O(34,65)K^L(56,1'2') \quad (C2.5)$$

mit $1 := (\alpha_1, t_{\alpha_1})$, aus der man abliest, dass wegen der totalen Antisymmetrie von V auch K^L total antisymmetrisch ist.

Es empfiehlt sich, in symmetrische Komponenten

$$V^N(12,1'2') = \frac{1}{2}\{\tilde{V}^N(12,1'2') - \tilde{V}^N(12,2'1')\} \quad (C2.6)$$

$$K^L(12,1'2') = \{\tilde{K}^L(12,1'2') - \tilde{K}^L(12,2'1')\} \quad (C2.7)$$

aufzuspalten, für die man mit der Definition (B3.6) die Gleichung

$$\tilde{K}^L(12,1'2') = \tilde{V}^N(12,1'2') + i\tilde{V}^N(12,34)G(35)G(46)\tilde{K}^L(56,1'2') \quad (C2.8)$$

erhält. Da die Wechselwirkung V^N instantan ist

$$\tilde{V}^N(12,1'2') = \delta(t_{\alpha_1} - t_{\alpha_2})\delta(t_{\alpha'_1} - t_{\alpha'_2})\delta(t_{\alpha_1} - t_{\alpha'_1}) \cdot \underset{V^N_{\alpha_1\alpha_2, \alpha'_1\alpha'_2}}{\quad} \quad (C2.9)$$

folgt (etwa durch Iteration von (C2.8)), dass in $\tilde{K}^L$ zwei Delta-Funktionen abgespalten werden können:

$$\tilde{K}^L(12,1'2') = \delta(t_{\alpha_1} - t_{\alpha_2})\delta(t_{\alpha'_1} - t_{\alpha'_2})K^L_{\alpha_1\alpha_2, \alpha'_1\alpha'_2}(t_{\alpha_1} - t_{\alpha'_1}) \quad (C2.10)$$

Daraus leitet man durch mehrfache Fouriertransformation ab, dass die symmetrische Komponente der durch (B5.17) definierten Funktion $K_{\alpha 1 \alpha 2, \alpha' 1 \alpha' 2}^L(\epsilon, \epsilon', \omega)$ vom letzten Argument unabhängig ist und von den ersten beiden nur über deren Summe abhängt:

$$\tilde{K}_{\alpha 1 \alpha 2, \alpha' 1 \alpha' 2}^L(\epsilon, \epsilon', \omega) = \frac{1}{2\pi} K_{\alpha 1 \alpha 2, \alpha' 1 \alpha' 2}^L(\epsilon + \epsilon') \quad (C2.11)$$

Mit $K^L(\epsilon)$ ist die Fouriertransformierte von $K^L(t)$ bezeichnet, der Faktor tritt auf wegen der unterschiedlichen Zahl der Variablen bei den Fouriertransformationen.

In der Ortsdarstellung nimmt die Gleichung für K^L nun die Form

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | K^L(t_1 - t'_1) | \vec{r}'_1 \vec{r}'_2 \rangle &= \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | V^N | \vec{r}'_1 \vec{r}'_2 \rangle \delta(t_1 - t'_1) + \\ &\int d\vec{r}_3 \dots d\vec{r}_6 dt_5 \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | V^N | \vec{r}_3 \vec{r}_4 \rangle \langle \vec{r}_3 \vec{r}_4 | \Lambda(t_1 - t_5) | \vec{r}_5 \vec{r}_6 \rangle \cdot \\ &\langle \vec{r}_5 \vec{r}_6 | K^L(t_5 - t'_1) | \vec{r}'_1 \vec{r}'_2 \rangle \end{aligned} \quad (C2.12)$$

an, wobei wir die Abkürzung

$$\langle \vec{r}_3 \vec{r}_4 | \Lambda(t_1 - t_5) | \vec{r}_5 \vec{r}_6 \rangle := iG(\vec{r}_3 t_1, \vec{r}_5 t_5) G(\vec{r}_4 t_1, \vec{r}_6 t_5) \quad (C2.13)$$

eingeführt haben. Nach Fouriertransformation $(t_1 - t'_1) \rightarrow \omega$ ergibt sich daraus

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | K^L(\omega) | \vec{r}'_1 \vec{r}'_2 \rangle &= \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | V^N | \vec{r}'_1 \vec{r}'_2 \rangle + \int d\vec{r}_3 \dots d\vec{r}_6 \cdot \\ &\langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | V^N | \vec{r}_3 \vec{r}_4 \rangle \langle \vec{r}_3 \vec{r}_4 | \Lambda(\omega) | \vec{r}_5 \vec{r}_6 \rangle \langle \vec{r}_5 \vec{r}_6 | K^L(\omega) | \vec{r}'_1 \vec{r}'_2 \rangle \end{aligned} \quad (C2.14)$$

Nun geht man zur Impulsdarstellung über, führt Relativimpulse $\vec{k}, \vec{k}'$ sowie Schwerpunktimpulse $\vec{K}, \vec{K}'$ ein und benutzt (C2.2).

Es folgt das vorläufige Ergebnis

$$\langle \vec{k} | K_{\vec{K}}^I(\omega) | \vec{k}' \rangle = \langle \vec{k} | V_{\vec{K}}^N | \vec{k}' \rangle + \int d\vec{k} d\vec{k}' \langle \vec{k} | V_{\vec{K}}^N | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | \Lambda_{\vec{K}}(\omega) | \vec{k}' \rangle \langle \vec{k}' | K_{\vec{K}}^I(\omega) | \vec{k} \rangle \quad (C2.15)$$

Das Wechselwirkungspotential V^N ist wegen seiner Galilei-invarianz unabhängig vom Schwerpunktimпульs. Wir werden sehen, dass sich die obige Gleichung noch vereinfachen lässt. Dazu betrachten wir die Grösse A etwas genauer: Wegen (B4.1), (B4.7) und (B4.19) können wir die G_1 -Funktion mit Hilfe der Spektralfunktion in der Form

$$G(\vec{r}_3 \vec{r}_5, \tau) = -i \{ \theta(\tau) \int \frac{d\omega'}{2\pi} e^{-i\omega'\tau} g(\vec{r}_3 \vec{r}_5, \omega') \cdot \theta(\omega') - \theta(-\tau) \int \frac{d\omega'}{2\pi} e^{-i\omega'\tau} g(\vec{r}_3 \vec{r}_5, \omega') \cdot \theta(-\omega') \} \quad (C2.16)$$

mit $\tau := (t_1 - t_2)$ schreiben, woraus wir

$$\langle \vec{r}_3 \vec{r}_4 | \Lambda(\omega) | \vec{r}_5 \vec{r}_6 \rangle = \int \frac{d\omega' d\omega''}{(2\pi)^2} g(\vec{r}_3 \vec{r}_5, \omega') g(\vec{r}_4 \vec{r}_6, \omega'') \cdot \left\{ \frac{\theta(\omega') \theta(\omega'')}{\omega - \omega' - \omega'' + i0} - \frac{\theta(-\omega') \theta(-\omega'')}{\omega - \omega' - \omega'' - i0} \right\} \quad (C2.17)$$

ableiten. Nach Übergang in die Impulsdarstellung folgt schliesslich

$$\langle \vec{k} | \Lambda_{\vec{K}}(\omega) | \vec{k}' \rangle = \delta(\vec{k} - \vec{k}') \int \frac{d\omega' d\omega''}{(2\pi)^2} g(\frac{\vec{K}}{2} + \vec{k}, \omega') g(\frac{\vec{K}}{2} - \vec{k}, \omega'') \{ \text{wie oben} \} \quad (C2.18)$$

Damit erhalten wir aus (C2.15) die Gleichung für die K-Matrix homogener Systeme in der Leiternäherung

$$\langle \vec{k} | K_{\vec{K}}^I(\omega) | \vec{k}' \rangle = \langle \vec{k} | V_{\vec{K}}^N | \vec{k}' \rangle + \int d\vec{k} \langle \vec{k} | V_{\vec{K}}^N | \vec{k} \rangle \left(\int \frac{d\omega' d\omega''}{(2\pi)^2} g(\frac{\vec{K}}{2} + \vec{k}, \omega') \cdot g(\frac{\vec{K}}{2} - \vec{k}, \omega'') \left\{ \frac{\theta(\omega') \theta(\omega'')}{\omega - \omega' - \omega'' + i0} - \frac{\theta(-\omega') \theta(-\omega'')}{\omega - \omega' - \omega'' - i0} \right\} \right) \langle \vec{k} | K_{\vec{K}}^I(\omega) | \vec{k}' \rangle \quad (C2.19)$$

Eine explizite oder numerische Lösung dieser Integralgleichung wird besonders durch die im Integranden auftretenden Theta-Funktionen erschwert. Die verschiedenen in der Literatur angegebenen Approximationen zu K klassifiziert man am besten mit Hilfe der jeweils für Λ gemachten Näherungen:

In der Puff'schen Λ^{00} -Näherung (Pu 61, Re 63) werden beide Spektralfunktionen g durch die Spektralfunktion

$$g^0(\vec{k}, \omega) = 2\pi\delta(\omega + \mu - \frac{\vec{k}^2}{2m^*}) \quad , \quad m^* := m/\hbar^2 \quad (C2.20)$$

freier Teilchen ersetzt. Damit lautet die K -Matrix-Gleichung für Werte von $\omega < |2\mu|$ und negatives chemisches Potential

$$\langle \vec{k} | K_K^{00}(\omega) | \vec{k}' \rangle = \langle \vec{k} | V^N | \vec{k}' \rangle + \int d\vec{k} \langle \vec{k} | V^N | \vec{k} \rangle \frac{1}{\omega + 2\mu - \frac{\vec{k}^2}{4m^*} - \frac{\vec{k}'^2}{m^*}} \langle \vec{k} | K_K^{00}(\omega) | \vec{k}' \rangle \quad (C2.21)$$

und entspricht -bis auf die Hinzufügung von $(2\mu - \frac{\vec{k}^2}{4m^*})$ im Energienenner- der Gleichung für die verallgemeinerte Streuamplitude zweier Nukleonen im Schwerpunktsystem. Puff konnte in seiner sehr sorgfältigen Analyse zeigen, dass diese Näherung der Vernachlässigung von Korrelationen eines Teilchens mit einem stark korrelierten Teilchenpaar entspricht und somit für Kernmaterie anwendbar sein sollte, obwohl das Pauli-Prinzip in den Zwischenzuständen nicht exakt erfüllt ist. Die sich aus den Rechnungen ergebende Impulsverteilung zeigt keine vollkommen scharfe Fermikante und folglich werden Abweichungen von einem reinen Einteilchenmodell möglich.

Analog kann man eine Λ^{01} -Näherung nach Ersetzen nur einer Spektralfunktion durch g^0 , sowie eine Λ^{11} -Näherung mit zwei vollen, selbstkonsistent in der Leiternäherung gegebenen Spektralfunktionen definieren und berechnen. Es zeigt sich (We 67), dass die wesentlichen Beiträge zu K bereits in Λ^{00} enthalten sind, während für Fragen, in denen die thermodynamische Konsistenz der Lösungen eine Rolle spielt, die Λ^{11} -Näherung anzuwenden ist.

Die Bruecknersche Λ^B -Näherung ergibt sich (We 68) aus der Λ^{11} -Näherung durch Übergang zu Hauptwertintegralen, wodurch sämtliche Größen der Theorie rein reell werden, und die Beiträge $\sim \theta(-\omega')\theta(-\omega'')$ wegfallen. Eine störungstheoretische Begründung dieser Vorschrift kann kaum Aufschluss über Gültigkeitsbereich und physikalische Deutung geben. Mit Hilfe der Separationsmethode von Scott und Moszkowski bzw. der Methode des Referenzspektrums (Ku 66) lassen sich K und -mit gewissen Einschränkungen- auch die Einteilchenenergien bestimmen. Da jedoch insbesondere das effektive Einteilchenpotential Σ reell ist, entspricht die Brueckner-Theorie einem reinen Einteilchenmodell -im Gegensatz zur Λ^{00} -Näherung. Bei allen bisher veröffentlichten Rechnungen wurde zusätzlich noch die Effektive-Masse-Näherung für Σ benutzt.

c) Blasennäherung (Ki 67)

Für das langreichweitige, lokale Coulombpotential V^C ist die Blasennäherung zu (B3.19) zu betrachten, also die Gleichung

$$T^B(12,1'2') = 2V^C(12,1'2') - 2iV^C(13,1'4)L^O(45,36)T^B(62,52') + 2iV^C(13,2'4)L^O(45,36)T^B(26,1'5) \quad (C2.22)$$

mit total antisymmetrischem T^B . Die wie früher eingeführten total symmetrischen Komponenten

$$V^C(12,1'2') = \frac{1}{2}\{\tilde{V}^C(12,1'2') - \tilde{V}^C(12,2'1')\} \quad (C2.23)$$

$$T^B(12,1'2') = \{\tilde{T}^B(12,1'2') - \tilde{T}^B(12,2'1')\} \quad (C2.24)$$

werden als lokal, die Coulombwechselwirkung als instantan angesetzt:

$$\tilde{V}^C(12,1'2') = V^C(12)\delta(11')\delta(22') \quad , \quad V^C(12) = V_{\alpha 1 \alpha 2}^C \delta(t_{\alpha 1} - t_{\alpha 2}) \quad (C2.25)$$

$$\tilde{T}^B(12,1'2') = T^B(12)\delta(11')\delta(22') \quad , \quad T^B(12) = T_{\alpha 1 \alpha 2}^B(t_{\alpha 1} - t_{\alpha 2}) \quad (C2.26)$$

und so ergibt sich in der Ortsdarstellung die Gleichung

$$T^B(\vec{r}_1 \vec{r}_2, t_1 - t_2) = V^C(\vec{r}_1 \vec{r}_2) \delta(t_1 - t_2) - i f_{\gamma} \int d\vec{r}_3 d\vec{r}_4 dt_4 \cdot \quad (C2.27)$$

$$V^C(\vec{r}_1 \vec{r}_3) G(\vec{r}_3 t_1, \vec{r}_4 t_4) G(\vec{r}_4 t_4, \vec{r}_3 t_1) T^B(\vec{r}_4 \vec{r}_2, t_4 - t_2)$$

Mit dem Degenerationsfaktor f_{γ} berücksichtigen wir Summationen über die inneren Quantenzahlen. Das weitere Vorgehen entspricht dem für K^L angegebenen; man erhält eine (C2.19)

entsprechende Gleichung

$$T^B(\vec{k}, \omega) = V^C(\vec{k}) + f_Y V^C(\vec{k}) \left(\int \frac{d\vec{k}''}{(2\pi)^3} \frac{d\omega' d\omega''}{(2\pi)^2} g(\vec{k} + \vec{k}'', \omega') g(\vec{k}'', \omega'') \cdot \right. \\ \left. \left\{ \frac{\theta(-\omega') \theta(\omega'')}{\omega' - \omega - \omega'' + i0} - \frac{\theta(\omega') \theta(-\omega'')}{\omega' - \omega - \omega'' - i0} \right\} \right) \quad (C2.28)$$

Nimmt man die Gültigkeit der Quasiteilchennäherung (B4.37) mit $z_\alpha \approx 1$ an, so lassen sich die obigen Integrale in speziellen Grenzfällen auswerten (Ki 67): Für die Coulombwechselwirkung zwischen Protonen

$$V^C(\vec{r}_1 \vec{r}_2) = q^2 \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \quad V^C(\vec{k}) = \frac{4\pi q^2}{k^2} \quad (C2.29)$$

folgt

$$T^B(\vec{k}, \omega) \approx V^C(\vec{k}) - f_Y V^C(\vec{k}) \frac{m p_0}{2\pi^2} T^B(\vec{k}, \omega) \quad (C2.30)$$

Der charakteristische Impuls p_0 wird mit dem Fermiimpuls p_F des Systems identifiziert, m ist die Protonenmasse. Bequem ist es, eine effektive, nicht retardierte T-Matrix in Blasen-näherung durch

$$T_{\text{eff}}^B(\vec{r}_1 \vec{r}_2) := \int d(t_1 - t_2) T^B(\vec{r}_1 \vec{r}_2, t_1 - t_2) \quad (C2.31)$$

einzuführen, für die man aus (C2.30) die Gleichung

$$T_{\text{eff}}^B(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = q^2 \frac{e^{-k_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (C2.32)$$

$$\text{mit } k_0 := 2\sqrt{p_F/a_0} \quad (C2.33)$$

ableitet. Die möglichen Spinzustände wurden durch $f_Y = 2$ berücksichtigt, a_0 ist der in (C1.4) definierte Bohrsche Radius.

Gleichung (C2.32) beschreibt eine abgeschirmte Coulombwechselwirkung der Abschirmlänge k_0 .

3. Räumlich inhomogene Systeme (endliche Kerne)

a) Basis und Symmetrien (Fa 59, La 64)

Zur Beschreibung räumlich inhomogener Nukleonen-Systeme, deren Eigenzustände durch die das Drehverhalten im R^3 bzw. Isoraum charakterisierenden Quantenzahlen $^{*}(J,I)$ bzw. (T,T) sowie weitere Quantenzahlen Γ exakt und vollständig klassifiziert werden können, sind Slaterdeterminanten aus simultanen Eigenzuständen $|j_1 t_1 \tau_1 \gamma\rangle$ der Drehimpulsoperatoren $\vec{j}^2$ und $\vec{j}_z$ sowie der Isospinoperatoren $\vec{t}^2$ und $\vec{t}_c^{**}$ der einzelnen Nukleonen günstige und nach Hinzunahme von Quantenzahlen γ vollständige Basiszustände: In dieser Darstellung sind die betrachteten Ein- bzw. Zwei-Teilchen-Operatoren weitgehend diagonal und ihre Matrixelemente lassen sich in einfacher Weise nach dem Wigner-Eckart-Theorem reduzieren. Wir wollen alle j_i, t_i als echt halbzahlig annehmen und wählen für γ die üblichen Schalenmodellquantenzahlen

$$\gamma := (n_l, s=1/2) \quad (C3.1)$$

*

Die Eigenwerte der Drehimpulsoperatoren $\vec{j}^2, \vec{j}_z, \vec{l}^2, \vec{l}_z, \vec{s}^2, \vec{s}_z, \vec{t}^2, \vec{t}_z$ sind $j(j+1), \dots, T(T+1)$, die Eigenwerte der Operatoren $\vec{j}_z, \dots, \vec{s}_z, \vec{t}_c, \vec{t}_c$ werden mit den entsprechenden griechischen Buchstaben $\iota, I, \lambda, \Lambda, \sigma, \Sigma, \tau, T$ bezeichnet. Wir setzen $\hat{j} := \sqrt{2j+1}$

**

$\tau = -1/2$ Protonenzustand
 $\tau = +1/2$ Neutronenzustand

worin $n = 0, 1, 2, \dots$ die Radialquantenzahl, l die Bahndrehimpulsquantenzahl und s den Gesamtspin eines Nukleons bedeuten. Um eine formal kompaktere Schreibweise zu erreichen, werden wir spezielle Indexmengen durch einen einfachen Index ersetzen:

$$i := (j_1 \ l_1 \ t_1 \ \tau_1, \gamma_1) \quad 1 := (J_1 \ I_1 \ T_1 \ T_1, \Gamma_1) \quad (C3.2)$$

$$p_1 := (j_1 \ t_1 \ \tau_1, \gamma_1) \quad P_1 := (J_1 \ T_1 \ T_1, \Gamma_1) \quad (C3.3)$$

$$q_1 := (j_1 \ t_1, \gamma_1) \quad Q_1 := (J_1 \ T_1, \Gamma_1) \quad (C3.4)$$

Die zugeordneten Erzeugungsoperatoren sind durch

$$|_1 > = a_1^+ | > \quad (C3.5)$$

gegeben.

Von grosser begrifflicher und formaler Bedeutung ist es, dass die hier betrachteten Grössen als sphärische Tensoren bzw. Tensoroperatoren aufgefasst werden können. Zweckmässigerweise konstruiert man irreduzible Tensoren, da dann die eleganten Methoden der Racah-Algebra anwendbar sind. Bezeichnungen, Definitionen und die wichtigsten Rechenregeln werden im Anhang B angegeben.

Wir unterscheiden konsequent zwischen kogredienten, irreduziblen Tensoren

$$T^{\{J\}} := \{T_{JI}^+\} \quad (C3.6)$$

und den dazu kontragredienten

$$\tilde{T}^{(J)} := \{\tilde{T}_{JI}\} \quad (C3.7)$$

bezüglich $SO(3)$, da insbesondere Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Teilchen mit definiertem Spin stets kontragredient zueinander sein müssen. Beispielsweise ist

$$a^{\{j_1 1/2\}} := \{a_{q_1, \iota_1 \tau_1}^+\} \quad (C3.8)$$

ein kogredienter, irreduzibler, sphärischer Tensoroperator, dessen Drehverhalten im R^3 durch j_1 , im Isoraum durch $t_1=1/2$ bestimmt ist. Uns interessieren besonders spezielle, irreduzible Produktoperatoren*, der Teilchen-Teilchen-Erzeugungsoperator

$$A_{q_1 q_2}^{\{j_1 1/2\} \{j_2 1/2\}} := (a_{q_1}^{\{j_1 1/2\}} a_{q_2}^{\{j_2 1/2\}}) \{j_1 1/2\} \{j_2 1/2\} \quad (C3.9)$$

dessen Komponenten also durch

$$A_{q_1 q_2, j_1 \iota_1 \tau_1 j_2 \iota_2 \tau_2}^+ = \sum_{\substack{\iota_1 \iota_2 \\ \tau_1 \tau_2}} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_1 j_2 \\ \iota_1 & \iota_2 & \iota_1 \iota_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & t_1 t_2 \\ \tau_1 & \tau_2 & \tau_1 \tau_2 \end{pmatrix} \cdot a_{q_1, \iota_1 \tau_1}^+ a_{q_2, \iota_2 \tau_2}^+ \quad (C3.10)$$

gegeben sind, sowie der Teilchen-Loch-Erzeugungsoperator

$$B_{q_1 q_2}^{\{j_1 1/2\} \{j_2 1/2\}} := (a_{q_1}^{\{j_1 1/2\}} a_{q_2}^{\{j_2 1/2\}}) \{j_1 1/2\} \{j_2 1/2\} \quad (C3.11)$$

*Es ist möglich, ganz analog Operatoren zu definieren, die bezüglich des Isoraums reduzibel sind.

mit den Komponenten

$$B_{q_1 q_2, j_{12} \iota_{12} t_{12} \tau_{12}}^+ = \sum_{\substack{\iota_1 \iota_2 \\ \tau_1 \tau_2}} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ \iota_1 & \iota_2 & \iota_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & t_{12} \\ \tau_1 & \tau_2 & \tau_{12} \end{pmatrix} \cdot \quad (C3.12)$$

$$a_{q_1, \iota_1 \tau_1}^+ (-)^{j_2 + \iota_2 + 1/2 + \tau_2} a_{q_2, -\iota_2 -\tau_2}$$

Die in den Clebsch-Gordan-Koeffizienten implizit enthaltenen Dreiecksrelationen lassen sich für echt halbzahlige j_i, t_i nur mit ganzzahligen j_{12} und t_{12} erfüllen. Bei (jj)-Kopplung lautet die durch Anwendung von A^+ auf das Vakuum erzeugte, irreduzible, nicht auf Eins normierte Teilkomponente in selbst-erklärender Bezeichnung explizit

$$A_{q_1 q_2}^{\{j_{12} \ t_{12}\}} |> = ((|n_{111}>_x |s_1>) \{j_1\}_x (|n_{212}>_x |s_2>) \{j_2\}) \{j_{12}\} \cdot \\ (|t_1>_x |t_2>) \{t_{12}\} + (-)^{j_1 + j_2 - j_{12} + 1/2 + 1/2 - t_{12} + 1} \\ ((|n_{212}>_x |s_2>) \{j_2\}_x (|n_{111}>_x |s_1>) \{j_1\}) \{j_{12}\} \cdot \quad (C3.13) \\ (|t_2>_x |t_1>) \{t_{12}\}$$

Hierin sind die dem R^3 bzw. Isoraum zugehörigen Anteile separiert. Wir geben noch die aus der Definition und den Eigenschaften der Clebsch-Gordan-Koeffizienten folgenden Umkehrformeln an

$$a_{q_1, \iota_1 \tau_1}^+ a_{q_2, \iota_2 \tau_2}^+ = \sum_{\substack{j_{12} \iota_{12} \\ t_{12} \tau_{12}}} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ \iota_1 & \iota_2 & \iota_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & t_{12} \\ \tau_1 & \tau_2 & \tau_{12} \end{pmatrix} \cdot \quad (C3.14)$$

$$A_{q_1 q_2, j_{12} \iota_{12} t_{12} \tau_{12}}^+$$

$$a_{q1,11\tau1}^+ a_{q2,12\tau2} = (-)^{j2-12+1/2-\tau2} \sum_{\substack{j12,12 \\ t12\tau12}} \begin{pmatrix} j1 & j2 & j12 \\ 11-12 & 12 & 12 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & t12 \\ \tau1 & -\tau2 & \tau12 \end{pmatrix} B_{q1q2,j12,12,t12,\tau12}^+ \quad (C3.15)$$

sowie die Formeln für die hermitesch adjungierten Operatoren

$$A_{q1q2}^{(j12 \ t12)} := \{A_{q1q2}^{(j12 \ t12)}\}^+ = (-)^{j1+j2-j12+1/2+1/2-t12} (a_{q2}^{(j2 \ 1/2)} x a_{q1}^{(j1 \ 1/2)}) (j12 \ t12) \quad (C3.16)$$

$$B_{q1q2}^{(j12 \ t12)} := \{B_{q1q2}^{(j12 \ t12)}\}^+ = (-)^{j1+j2-j12+1/2+1/2-t12} K_{\{j12 \ t12\}} B_{q2q1}^{(j12 \ t12)} \quad (C3.17)$$

und die Symmetriebeziehung

$$A_{q1q2}^{(j12 \ t12)} = -(-)^{j1+j2-j12+1/2+1/2-t12} A_{q2q1}^{(j12 \ t12)} \quad (C3.18)$$

Ist $Q^{\{k \ r\}}$ ein sphärischer Tensoroperator, so gilt das Wigner-Eckart-Theorem (Ed 64)

$$\langle 1 | Q_{k\kappa, r\rho} | 2 \rangle = \frac{1}{j1} \frac{1}{1/2} \begin{pmatrix} j2 & k & j1 \\ 12 & \kappa & 11 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & r & 1/2 \\ \tau2 & \rho & \tau1 \end{pmatrix} \langle q1 || Q^{kr} || q2 \rangle \quad (C3.19)$$

das speziell für total skalare Operatoren $Q^{\{0 \ 0\}}$ die Form

$$\langle 1 | Q_{00,00} | 2 \rangle = \frac{1}{j1} \frac{1}{1/2} \delta_{j1j2} \delta_{1112} \delta_{\tau1\tau2} \langle q1 || Q^{00} || q2 \rangle \quad (C3.20)$$

annimmt. Die reduzierten Matrixelemente $\langle q1 || Q^{kr} || q2 \rangle$

hängen nicht von magnetischen Quantenzahlen ab und können beispielsweise berechnet werden, wenn das Matrixelement auf der linken Seite von (C3.19) für einen speziellen Satz dieser Quantenzahlen bekannt ist. Da j_i , t_i echt halbzahlige sind, lassen sich die in den Clebsch-Gordan-Koeffizienten implizit enthaltenen Dreiecksrelationen nur mit ganzzahligen k und r erfüllen.

Matrixelemente für Zwei-Teilchen-Operatoren kann man aus (B1.11) durch Entwicklung nach irreduziblen Tensoroperatoren gemäss (C3.14) und nach Anwendung des Wigner-Eckart-Theorems berechnen. Es folgt:

$$\begin{aligned} \langle 12 | Q_{k\kappa, r\rho} | 34 \rangle &= \frac{\overbrace{j_{12} j_{12} t_{12} \tau_{12}}^{j_{12} j_{12} t_{12} \tau_{12}}}{j_{34} j_{34} t_{34} \tau_{34}} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_{12} \\ 12 & 11 & 112 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_3 & j_4 & j_{34} \\ 13 & 14 & 134 \end{pmatrix} \cdot \\ &\begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & t_{12} \\ \tau_2 & \tau_1 & \tau_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & t_{34} \\ \tau_3 & \tau_4 & \tau_{34} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{34} & k & j_{12} \\ 134 & \kappa & 112 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{34} & r & t_{12} \\ \tau_{34} & \rho & \tau_{12} \end{pmatrix}. \quad (C3.21) \\ &\frac{1}{j_{12}} \frac{1}{t_{12}} \langle q_1 q_2 || Q_{j_{12} t_{12} j_{34} t_{34}}^{kr} || q_3 q_4 \rangle \end{aligned}$$

mit den von magnetischen Quantenzahlen unabhängigen, reduzierten Matrixelementen (Teilchen-Teilchen-Matrixelementen)

$$\begin{aligned} \langle q_1 q_2 || Q_{j_{12} t_{12} j_{34} t_{34}}^{kr} || q_3 q_4 \rangle &:= \frac{j_{12} \hat{t}_{12}}{\begin{pmatrix} j_{34} & k & j_{12} \\ 134 & \kappa & 112 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{34} & r & t_{12} \\ \tau_{34} & \rho & \tau_{12} \end{pmatrix}} \cdot \\ &(-)^{j_1 + j_2 - j_{12} + 1/2 + 1/2 - t_{12}}. \quad (C3.22) \end{aligned}$$

$$\langle A_{q_1 q_2, j_{12} j_{12} t_{12} \tau_{12}} Q_{k\kappa, r\rho} A_{q_3 q_4, j_{34} j_{34} t_{34} \tau_{34}}^+ \rangle$$

Speziell für $k=r=0$ sind die k und r enthaltenden Clebsch-Gordan-Koeffizienten in den obigen Formeln gleich Eins und es ist

$$\langle q_1 q_2 || Q_{j_1 2 t_1 2 j_3 4 t_3 4}^{00} || q_3 q_4 \rangle = \delta_{j_1 2 j_3 4} \delta_{t_1 2 t_3 4} \delta_{j_1 2 t_3 4} \cdot \quad (C3.23)$$

$$\delta_{t_1 2 t_3 4} \langle q_1 q_2 || Q_{j_1 2 t_1 2}^{00} || q_3 q_4 \rangle$$

mit

$$\langle q_1 q_2 || Q_{j_1 2 t_1 2}^{00} || q_3 q_4 \rangle := (-)^{j_1 + j_2 - j_1 2 + 1/2 + 1/2 - t_1 2} \cdot \quad (C3.24)$$

$$j_1 \hat{t}_1 \hat{t}_2 \langle A_{q_1 q_2, j_1 2 t_1 2 t_1 2} Q_{00,00} A_{q_3 q_4, j_1 2 t_1 2 t_1 2}^+ \rangle$$

Wir geben noch die Symmetrierelationen

$$\langle q_1 q_2 || Q_{j_1 2 t_1 2 j_3 4 t_3 4}^{kr} || q_3 q_4 \rangle = \quad (C3.25)$$

$$= (-)^{j_1 + j_2 - j_1 2 - t_1 2} \langle q_2 q_1 || Q_{j_1 2 t_1 2 j_3 4 t_3 4}^{kr} || q_3 q_4 \rangle$$

$$= (-)^{j_3 + j_4 - j_3 4 - t_3 4} \langle q_1 q_2 || Q_{j_1 2 t_1 2 j_3 4 t_3 4}^{kr} || q_4 q_3 \rangle \quad (C3.26)$$

sowie die für skalare hermitesche Operatoren $H^{(0\ 0)} = H^{\{0\ 0\}}$ gültige Beziehung

$$\langle q_1 q_2 || H_{j_1 2 t_1 2}^{00} || q_3 q_4 \rangle = (-)^{j_1 + j_2 + j_3 + j_4} \langle q_3 q_4 || H_{j_1 2 t_1 2}^{00} || q_1 q_2 \rangle^* \quad (C3.27)$$

an.

In Gleichung (C3.21) sind die vier Drehimpulse $j_1 \dots j_4$ -und ebenso die Isospinquantenzahlen- in natürlicher Weise zu Paaren $(j_1 j_2)$ und $(j_3 j_4)$ zusammengefasst. Man kann aber auch eine Kopplungsordnung $(j_1 j_3)$ und $(j_2 j_4)$ erreichen, was in vielen Anwendungen eine wichtige Rolle spielt, indem man umgekoppelte Matrixelemente (Teilchen-Loch-Matrixelemente) für total skalare Operatoren durch

$$\langle\langle q_1 q_2 || Q_{j_t}^{00} || q_3 q_4 \rangle\rangle := \sum_{j't'} \hat{j} \hat{j}' \hat{t} \hat{t}' \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ j_4 & j_3 & j \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1/2 & 1/2 & t' \\ 1/2 & 1/2 & t \end{Bmatrix}. \quad (C3.28)$$

$$\langle q_1 q_2 || Q_{j_t}^{00} || q_3 q_4 \rangle$$

definiert. Die Umkehrung dieser Gleichung mit Hilfe der Orthogonalitätsrelationen der 6-j-Symbole lautet völlig symmetrisch

$$\langle q_1 q_2 || Q_{j_t}^{00} || q_3 q_4 \rangle = \sum_{j't} \hat{j} \hat{j}' \hat{t} \hat{t}' \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ j_4 & j_3 & j \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1/2 & 1/2 & t' \\ 1/2 & 1/2 & t \end{Bmatrix}. \quad (C3.29)$$

$$\langle\langle q_1 q_2 || Q_{j_t}^{00} || q_3 q_4 \rangle\rangle$$

und aus den Symmetrieeigenschaften der reduzierten Matrixelemente bzw. der 6-j-Symbole folgt

$$\langle\langle q_2 q_1 || Q_{j_t}^{00} || q_4 q_3 \rangle\rangle = (-)^{j_1+j_2+j_3+j_4} \langle\langle q_1 q_2 || Q_{j_t}^{00} || q_3 q_4 \rangle\rangle. \quad (C3.30)$$

Vertauschung nur zweier Indizes einer Seite liefert keine einfache Symmetrierelation. Für hermitesche Operatoren folgt

aus (C3.27) die Gleichung

$$\langle\langle q_1 q_2 || H_{jt}^{00} || q_3 q_4 \rangle\rangle = (-)^{j_1+j_2+j_3+j_4} \langle\langle q_3 q_4 || H_{jt}^{00} || q_1 q_2 \rangle\rangle^* \quad (C3.31)$$

Unter Benutzung der angegebenen Definitionen leitet man aus der Umkopplungsformel der Clebsch-Gordan-Koeffizienten

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ 11 & 12 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_3 & j_4 & j \\ 13 & 14 & 1 \end{pmatrix} = (-)^{j_1-11+j_3-13} (2j+1) \cdot \sum_{j', 1'} \begin{pmatrix} j_1 & j_4 & j' \\ -11 & 14 & 1' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j' \\ -12 & 13 & -1' \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ j_3 & j_4 & j' \end{Bmatrix} \quad (C3.32)$$

durch Einsetzen in (C3.21) die Gleichung

$$\langle 12 | Q_{0000} | 34 \rangle = (-)^{j_2-12+j_3-13+1/2-\tau_2+1/2-\tau_3} \cdot \quad (C3.33)$$

$$\sum_{\substack{j_1 \\ t \tau}} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j \\ -11 & 13 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & j_4 & j \\ -12 & 14 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & t \\ -\tau_1 & \tau_3 & \tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & t \\ -\tau_2 & \tau_4 & -\tau \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{j} \frac{1}{t} \langle\langle q_1 q_2 || Q_{jt}^{00} || q_3 q_4 \rangle\rangle$$

ab, in der die gewünschte Kopplungsordnung erreicht ist.

Mit Hilfe der Teilchen-Loch-Erzeugungsoperatoren lassen sich auch die in Gleichung (B5.5) definierten, speziellen Matrixelemente $\rho_{\alpha\beta}^k$ des Dichteoperators reduzieren. Hierzu identifiziert man die Einteilchenzustände $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ mit $|_2\rangle, |_1\rangle$ und den die Eigenzustände des A-Teilchen-Systems klassifizierenden Index k mit der Menge $1 = (J_1 I_1 T_1 T_1, \Gamma_1)$, entwickelt das reduzierbare Operatorenprodukt $a_1^+ a_2$ gemäss (C3.15) nach irreduziblen Teilchen-Loch-Erzeugungsoperatoren B^+ und wendet das

Wigner-Eckart-Theorem an. Man erhält so die Formel

$$\begin{aligned} \rho_{21}^{(JITT, \Gamma)} &= \frac{1}{i} \langle J_0 I_0 T_0 T_0, \Gamma_0 | a_1^+ a_2 | JITT, \Gamma \rangle \\ &= \frac{1}{i} (-)^{j_2 - i_2 + 1/2 - \tau_2} \sum_{j_1 t \tau} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ i_1 - i_2 & i & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J & j & J_0 \\ I & i & I_0 \end{pmatrix} \cdot \\ &\quad \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & t \\ \tau_1 & -\tau_2 & \tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T & t & T_0 \\ T & \tau & T_0 \end{pmatrix} \frac{1}{J_0} \cdot \frac{1}{T_0} \cdot \langle Q_0 | | B_{q_1 q_2}^{+jt} | | Q \rangle \end{aligned} \quad (C3.34)$$

in der die Quantenzahlen des Grundzustandes durch den Index Null gekennzeichnet sind.

b) Reduktion der Eigenwertgleichung

Mit den angegebenen Methoden ist es möglich, die Eigenwertgleichung (B5.32) bezüglich verschiedener Werte der Systemquantenzahl $Q = (JT, \Gamma)$ zu entkoppeln, falls die Wechselwirkung $F(\omega)$ vom Energieargument unabhängig und ein im R^3 und im Isoraum skalarer, hermitescher Operator

$$F(\omega) = F\{0 \ 0\} = F(0 \ 0) \quad (C4.1)$$

ist. Man benutzt die Reduktion (C3.34) der Dichtematrix und -wegen der dadurch vorgegebenen Kopplungsreihenfolge - die Entwicklung (C3.33) für F , setzt in die Eigenwertgleichung ein und erhält nach Ausführen der Summationen über die magnetischen Quantenzahlen $i_2 i_4, \tau_2 \tau_4$ die Relation

$$\begin{aligned} (\epsilon_1 - \epsilon_3 - \omega_A^{(JITT, \Gamma)}) \sum_{j_1 t \tau} \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & j \\ i_3 - i_1 & i & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J & j & J_0 \\ I & i & I_0 \end{pmatrix} \cdot \\ \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & t \\ \tau_3 & -\tau_1 & \tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T & t & T_0 \\ T & \tau & T_0 \end{pmatrix} \frac{1}{\hat{J}_0 \hat{T}_0} \langle Q_0 | | B_{q_3 q_1}^{+jt} | | Q \rangle = \\ = (n_1 - n_3) \sum_{j_1 t \tau} \frac{1}{j t} \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & j \\ i_3 - i_1 & i & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J & j & J_0 \\ I & i & I_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & t \\ \tau_3 & -\tau_1 & \tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T & t & T_0 \\ T & \tau & T_0 \end{pmatrix} \cdot \\ \cdot \frac{1}{\hat{J}_0 \hat{T}_0} \langle q_1 q_2 | | F_{jt}^{00} | | q_3 q_4 \rangle \langle Q_0 | | B_{q_2 q_4}^{+jt} | | Q \rangle \end{aligned} \quad (C4.2)$$

die sich wesentlich vereinfachen lässt, wenn man annehmen darf, dass Differenzen $(\epsilon_i - \epsilon_j)$ von Einteilchenenergien und die Besetzungszahlen n_i nicht von den magnetischen Quantenzahlen i und τ abhängen. Ist keine Richtung des Systems vor den anderen ausgezeichnet, so folgt aus Symmetrieüberlegungen, dass die von der Wahl eines speziellen Koordinatensystems unabhängigen Größen n_i und ϵ_i nicht von der Spinprojektion i abhängen; das wird im allgemeinen dagegen nicht bezüglich der Isospinprojektion τ gelten. Erst kürzlich konnte wieder gezeigt werden (Ma 67, Co 68), dass sich Protonen- und Neutronen-Einteilchenenergien für festes A in sehr guter Näherung nur um eine Konstante

$$\epsilon_{q1,\tau=+1/2} \approx \epsilon_{q1,\tau=-1/2} - C_A \quad (C4.3)$$

unterscheiden; die Differenzen $(\epsilon_{q1\tau1} - \epsilon_{q3\tau3})$ sind also dann von $\tau1$ und $\tau3$ unabhängig, wenn wir die plausible Annahme der Ladungserhaltung für die Zwischenzustände (Teilchen-Loch-Anregungen) machen, also $\tau1 = \tau3$ setzen. Beschränken wir uns zudem auf selbstkonjugierte Kerne mit $N=Z$, so wird auch $n_1 = n_{q1}$.*

* Diese Einschränkungen können vermieden werden, wenn auf die Forderung scharfer Isospinquantenzahlen (TT) für die Anregungszustände des Systems verzichtet wird. Man gewinnt die dementsprechenden Gleichungen aus den angegebenen, indem man q_i durch p_i ersetzt, alle Isospinindizes weglässt und die isospinabhängigen Faktoren gleich Eins setzt. Natürlich sind die resultierenden Beziehungen nicht so weitgehend reduziert.

Unter den obigen Voraussetzungen folgt aus (C4.2) durch Ausnutzung der Orthogonalität der Clebsch-Gordan-Koeffizienten und nach Kürzen gemeinsamer Faktoren

$$(\epsilon_{q1} - \epsilon_{q3} - \omega_A^Q) \langle Q_0 | |B_{q3q1}^{+jt}| | Q \rangle =$$

$$\frac{(n_{q1} - n_{q3})}{j \quad t} \sum_{q2q4} \langle q1q2 | |F_{jt}^{00}| | q3q4 \rangle \langle Q_0 | |B_{q2q4}^{+jt}| | Q \rangle \quad (C4.4)$$

Man beachte, dass damit die magnetischen Quantenzahlen $I, T, i1 \dots i4, \tau1 \dots \tau4$ aus der Ausgangsgleichung (B5.32) vollkommen eliminiert sind. Die relative Parität des angeregten Systemzustandes $Q = (J, T, \Pi)$ gegenüber dem Grundzustand Q_0 ist durch $\Pi = (-)^{l_1+l_3} = (-)^{l_2+l_4}$ gegeben und für $J_0=T_0=0$ können die Systemquantenzahlen mit den Quantenzahlen des Zwei-Teilchen-Systems identifiziert werden: $j=J, t=T$. Ausser durch die Forderung einer bestimmten relativen Parität werden also die zulässigen Kombinationen von Einteilchenzuständen noch durch die implizit in den umgekoppelten Matrixelementen enthaltenen Dreiecksrelationen für Drehimpulse eingeschränkt, sowie in der Praxis durch Ausschliessung von Kombinationen, die sich energetisch um mehr als einen vorgegebenen Betrag unterscheiden.

Gleichung (C4.4) wollen wir in einer etwas übersichtlicheren Form möglichst hoher Symmetrien schreiben. Dazu definieren wir die Abkürzungen

$$F_{q1q3,q4q2}^{jt} := \langle q1q2 | |F_{jt}^{00}| | q3q4 \rangle \quad (C4.5)$$

$$W_{q1q3}^{jt,Q} := \langle Q_0 | |B_{q3q1}^{+jt}| | Q \rangle \quad (C4.6)$$

$$U_{q1q3}^{jt,Q} := (-)^{J_0-J+T_0-T} \langle Q | |B_{q3q1}^{+jt}| | Q_0 \rangle^* \quad (C4.7)$$

und leiten aus (C3.25) bis (C3.27) die Symmetrierelationen

$$\begin{aligned} F_{q_1 q_3, q_4 q_2}^{jt} &= (-)^{j_1+j_2+j_3+j_4} F_{q_2 q_4, q_3 q_1}^{jt} \\ &= (-)^{j_1+j_2+j_3+j_4} F_{q_3 q_1, q_2 q_4}^{jt*} = F_{q_4 q_2, q_1 q_3}^{jt*} \quad (C4.8) \end{aligned}$$

und aus (C3.17) sowie der Definition der reduzierten Matrixelemente die Beziehung

$$U_{q_1 q_3}^{jt, Q} = (-)^{j_1-j_3} W_{q_3 q_1}^{jt, Q} \quad (C4.9)$$

ab. Es empfiehlt sich weiter, die Menge M der ungeordneten Indexpaare $\{q_i q_j\}$ mit $(n_i - n_j) \neq 0$ in zwei disjunkte Teilmengen $\overset{\leftarrow}{M}$ und $\vec{M}$ geordneter Indexpaare $\langle q_i q_j \rangle$ nach

$$\overset{\leftarrow}{M} := \{\langle q_i q_j \rangle \mid n_i=1, n_j=0\}, \quad \vec{M} := \{\langle q_i q_j \rangle \mid n_i=0, n_j=1\} \quad (C4.10)$$

zu zerlegen. Beschränkt man den Konfigurationsraum auf eine endliche Zahl N_D von möglichen Kombinationen je eines unbesetzten und eines besetzten Zustands, so ist die Mächtigkeit der Menge M durch

$$\mathcal{M}(M) = \mathcal{M}(\overset{\leftarrow}{M} + \vec{M}) = \mathcal{M}(\overset{\leftarrow}{M}) + \mathcal{M}(\vec{M}) = N_D + N_D \quad (C4.11)$$

gegeben; es ist also möglich, in M eine Wohlordnung mit $\overset{\leftarrow}{M} < \vec{M}$ einzuführen und die Elemente eineindeutig auf die ganzen Zahlen $(1 \dots N_D)$ bzw. $(N_D+1 \dots 2N_D)$ abzubilden. Die dabei dem geordneten Paar $\langle q_i q_j \rangle$ entsprechende Zahl bezeichnen wir mit $(q_i q_j)$ und übertragen die Ordnungsstruktur von $\overset{\leftarrow}{M}$ auf $\vec{M}$ wie folgt:

$$(q_j q_i) = (q_i q_j) + N_D \quad \text{für} \quad (q_i q_j) \in \{1, \dots, N_D\} \quad (C4.12)$$

Wir wählen nun spezielle Indexpaare $\langle \underline{q1q3} \rangle$, $\langle \underline{q4q2} \rangle \in \check{M}$ und schreiben (C4.4) für die beiden möglichen Indexzuordnungen $q1=\underline{q1}$, $q3=\underline{q3}$ bzw. $q1=\underline{q3}$, $q3=\underline{q1}$ nochmals auf:

$$(\epsilon_{\underline{q1}} - \epsilon_{\underline{q3}} - \omega_A^Q) W_{(\underline{q1q3})}^{jt,Q} = \frac{(+1)}{\hat{j} \hat{t}} \left\{ \sum_{(\underline{q4q2})} F_{(\underline{q1q3}), (\underline{q4q2})}^{jt} W_{(\underline{q4q2})}^{jt,Q} + \sum_{(\underline{q2q4})} F_{(\underline{q1q3}), (\underline{q2q4})}^{jt} W_{(\underline{q2q4})}^{jt,Q} \right\} \quad (C4.13)$$

$$(\epsilon_{\underline{q3}} - \epsilon_{\underline{q1}} - \omega_A^Q) W_{(\underline{q3q1})}^{jt,Q} = \frac{(-1)}{\hat{j} \hat{t}} \left\{ \sum_{(\underline{q4q2})} F_{(\underline{q3q1}), (\underline{q4q2})}^{jt} W_{(\underline{q4q2})}^{jt,Q} + \sum_{(\underline{q2q4})} F_{(\underline{q3q1}), (\underline{q2q4})}^{jt} W_{(\underline{q2q4})}^{jt,Q} \right\} \quad (C4.14)$$

Mit den Symmetrien (C4.8) und (C4.9) folgen daraus die Gleichungen

$$\omega_A^Q W_{(\underline{q1q3})}^{jt,Q} = \sum_{(\underline{q4q2})} \left\{ \left[(\epsilon_{\underline{q1}} - \epsilon_{\underline{q3}}) \delta_{\underline{q1q4}} \delta_{\underline{q3q2}} - \frac{1}{\hat{j} \hat{t}} F_{(\underline{q1q3}), (\underline{q4q2})}^{jt} \right] W_{(\underline{q4q2})}^{jt,Q} + \frac{(-)^{j2+j4}}{\hat{j} \hat{t}} F_{(\underline{q1q3}), (\underline{q2q4})}^{jt} U_{(\underline{q4q2})}^{jt,Q} \right\} \quad (C4.15)$$

$$\omega_A^Q U_{(\underline{q1q3})}^{jt,Q} = \sum_{(\underline{q4q2})} \left\{ \left[(\epsilon_{\underline{q3}} - \epsilon_{\underline{q1}}) \delta_{\underline{q1q4}} \delta_{\underline{q3q2}} + \frac{1}{\hat{j} \hat{t}} F_{(\underline{q1q3}), (\underline{q4q2})}^{jt*} \right] U_{(\underline{q4q2})}^{jt,Q} - \frac{(-)^{j2+j4}}{\hat{j} \hat{t}} F_{(\underline{q1q3}), (\underline{q2q4})}^{jt*} W_{(\underline{q4q2})}^{jt,Q} \right\} \quad (C4.16)$$

die man auch übersichtlich in Form einer Matrixeigenwertgleichung schreiben kann:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} W^{jt,Q} \\ U^{jt,Q} \end{pmatrix} = \omega_A^Q \begin{pmatrix} W^{jt,Q} \\ U^{jt,Q} \end{pmatrix} \quad (C4.17)$$

Die $(N_D \times N_D)$ -Matrizen A und B sind definiert durch

$$A_{(\underline{q1q3}),(\underline{q4q2})} := (\epsilon_{\underline{q1}} - \epsilon_{\underline{q3}}) \delta_{(\underline{q1q3}),(\underline{q4q2})} - \frac{1}{j t} F_{jt}^{jt}(\underline{q1q3}),(\underline{q4q2}) \quad (C4.18)$$

$$B_{(\underline{q1q3}),(\underline{q2q4})} := \frac{(-)^{j2+j4}}{j \ t} F_{jt}^{jt}(\underline{q1q3}),(\underline{q2q4}) \quad (C4.19)$$

und die Spaltenvektoren $W^{jt,Q}$ und $U^{jt,Q}$ enthalten die Elemente $W_{(\underline{q1q3})}^{jt,Q}$, $U_{(\underline{q1q3})}^{jt,Q}$ in der natürlichen Reihenfolge. Aus den Definitionen folgt, dass die Komponenten von $U^{jt,Q}$ bis auf Faktoren den Überlapp des angeregten Systemzustands Q mit dem aus dem Grundzustand durch Vernichtung eines Teilchens der (Ein-Teilchen-Modell-)-Besetzungszahl $n_{q1}=1$ und Erzeugung eines Teilchens mit $n_{q3}=0$ entstehenden Zustand angeben, während die Komponenten von $W^{jt,Q}$ den Überlapp zwischen Q und einem durch Vernichtung eines Teilchens oberhalb der (Ein-Teilchen-Modell-)-Fermikante sowie Erzeugung eines Teilchens unterhalb aus dem Grundzustand Q_0 entstehenden Zustand entsprechen. In einem reinen Ein-Teilchen-Modell verschwinden also alle Elemente von $W^{jt,Q}$ und alle bis auf eines von $U^{jt,Q}$. Aufweichungen der Fermikante sind durch nichtverschwindende $W^{jt,Q}$ -Komponenten, komplexe Systemanregungen dadurch gekennzeichnet, dass $U^{jt,Q}$ bzw. $W^{jt,Q}$ mehrere Komponenten gleicher Größenordnung enthalten. Man rechnet leicht nach, dass A hermitesch und B symmetrisch ist:

$$A^+ := A^{T*} = A \quad , \quad B^T = B \quad (C4.20)$$

Dagegen ist die volle $(2N_D) \times (2N_D)$ -Matrix

$$C := \begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^* \end{pmatrix} \neq C^+ = \begin{pmatrix} A & -B \\ B^* & -A^* \end{pmatrix} \quad (C4.21)$$

nicht hermitesch, sodass auch komplexe Eigenwerte ω_A^Q nicht auszuschliessen sind. Die spezielle Struktur von C bedingt jedoch wichtige formale Eigenschaften der Eigensysteme (Th 61): Ist $\begin{pmatrix} W^{jt,Q} \\ U^{jt,Q} \end{pmatrix}$ Eigenvektor von C zum Eigenwert ω_A^Q , so ist auch $\begin{pmatrix} U^{jt,Q} \\ W^{jt,Q} \end{pmatrix}^*$ Eigenvektor mit dem Eigenwert $\tilde{\omega}_A^Q = -\omega_A^{Q*}$. Unter der weiteren Annahme, dass die hermitesche Matrix

$$\tilde{C} := \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \quad (C4.22)$$

positiv semidefinit ist*, lässt sich zeigen, dass alle Eigenwerte von C reell sind und eine Orthogonalitätsrelation der Form

$$\begin{pmatrix} W^{jt,Q1} \\ U^{jt,Q1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} W^{jt,Q2} \\ U^{jt,Q2} \end{pmatrix} = \delta_{Q1Q2} \operatorname{sgn}(\omega_A^{Q1}) \quad (C4.23)$$

*Diese Bedingung ist erfüllt, wenn die gewählten (oder berechneten) Einteilchenzustände $|_1\rangle$ stabile, selbstkonsistente Lösungen der Hartree-Fock-Gleichungen sind.

besteht, die sich von der entsprechenden Relation für Eigenvektoren hermitescher Matrizen nur durch Vorzeichen unterscheidet. Ist C positiv definit, so kann man für die Eigenvektoren von C eine Vollständigkeitsrelation ableiten. Nur reelle, positive Eigenwerte entsprechen physikalisch sinnvollen Anregungszuständen des Systems.

Das Auftreten eines verschwindenden Eigenwertes $\omega_A^Q = 0$ hängt eng mit den unphysikalischen Geisterzuständen ("spurious states") des Schalenmodells zusammen (El 55, Th 64): Während die Schwerpunktsbewegung eines Vielteilchensystems exakt durch eine ebene Welle beschrieben wird, ist bei Schalenmodellrechnungen ein räumlich fixiertes Koordinatensystem eingeführt, in dem die Schwerpunktskoordinate um den Mittelwert Null oszilliert. Eigenzustände des Schalenmodellhamiltonoperators enthalten daher ausser den gesuchten Eigenzuständen des Hamiltonoperators der Relativbewegung noch Beimischungen von Schwerpunktsanregungen; diese sind bei Rechnungen in einem Oszillatorpotential besonders stark für $(JT)^{\overline{11}} = (10)^{-}$ Zustände. Thouless (Th 61) konnte im Rahmen der Hartree-Fock-Theorie zeigen, dass solche Geisterzustände Eigenwerten $\omega_A^Q = 0$ entsprechen und zu den anderen Zuständen orthogonal sind, falls die gewählte Einteilchenbasis eine stabile, selbstkonsistente Lösungsmannigfaltigkeit der Hartree-Fock-Gleichungen darstellt. Verwendet man dagegen näherungsweise Oszillatorfunktionen als Basis, so ist eine Störung vor allem der $(10)^{-}$ -Niveaux zu erwarten. Die Situation ist aber erfahrungsgemäss nicht sehr kritisch: Der

Wert des Überlapps zwischen dem niedrigsten berechneten $(10)^{-}$ -Zustand und der niedrigsten Schwerpunktsoszillation ist meist sehr gross -bis zu Werten von 0.95-, sodass man den berechneten Zustand als näherungsweise reinen Geisterzustand weglassen und seinen Einfluss auf die übrigen Zustände wegen der Orthogonalität vernachlässigen kann. Eine genauere Methode zur Behandlung der spurious states besteht darin, die Schwerpunktsanteile aus den Lösungen herauszuprojizieren oder die Wechselwirkung geeignet zu modifizieren.

(Bi 67)

c) Oszillatorbasis

Es empfiehlt sich oftmals, Schalenmodellzustände $|n'l'\lambda'\rangle$ nach den Eigenzuständen $|\frac{1}{\lambda}n\rangle$ des dreidimensionalen harmonischen Oszillators zu entwickeln. Diese bezeichnen wir in der Ortsdarstellung durch den irreduziblen, sphärischen Tensor $H_n^{\{1\}}(\vec{r}_1) = \{\langle \vec{r}_1 | n \rangle\}$, den dazu kontragredienten Tensor mit $H_n^{(1)}(\vec{r}_1)$ und vereinbaren folgende Phasenkonvention:

$$H_{n_i l_i}^{\{1\}}(\vec{r}_i) = W_{n_i l_i}(\frac{r_i}{a_i}) Y^{\{1\}}_{l_i}(\hat{r}_i); H_{n_i l_i}^{(1)}(\vec{r}_i) = \tilde{W}_{n_i l_i}(\frac{r_i}{a_i}) Y^{(1)}_{l_i}(\hat{r}_i) \quad (C5.1)$$

$$W_{n_i l_i}(\frac{r_i}{a_i}) = (-)^{n_i} R_{n_i l_i}(\frac{r_i}{a_i}); \tilde{W}_{n_i l_i}(\frac{r_i}{a_i}) = W_{n_i l_i}^*(\frac{r_i}{a_i}) \quad (C5.2)$$

$$R_{n_i l_i}(\frac{r_i}{a_i}) := \left[\frac{2^{n_i} n_i!}{a_i^3 \Gamma(n_i + l_i + \frac{3}{2})} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{r_i}{a_i} \right)^{l_i} \cdot e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{r_i}{a_i} \right)^2} \cdot L_{n_i}^{(l_i + \frac{1}{2})} \left(\left(\frac{r_i}{a_i} \right)^2 \right) \quad (C5.3)$$

$$Y^{\{1\}}_{l_i}(\hat{r}_i) := \{Y_{l_i \lambda_i}(\theta_i, \phi_i)\} \quad (C5.4)$$

$$a_i := \left(\frac{\hbar}{m \cdot \omega_{osz}} \right)^{1/2} \quad (C5.5)$$

Die verallgemeinerten Laguerre-Polynome $L_n^{(\alpha)}$ sind in (Ab 65) definiert, mit $Y_{1\lambda}$ werden die mit i^1 multiplizierten Kugelflächenfunktionen der Condon-Shortley-Konvention bezeichnet, die Oszillatorfrequenz ω_{osz} ist ein Mass für die Stärke des Potentials, a_i bezeichnet man als Oszillatorlänge. Für die Fouriertransformierten mit dem Oszillatorimpuls c_i ergibt sich

$$H_{n_i l_i}^{\{1_i\}}(\vec{k}_i) = W_{n_i l_i}(\frac{k_i}{c_i}) Y^{\{1_i\}}(\hat{k}_i) ; H_{n_i l_i}^{(1_i)}(\vec{k}_i) = \tilde{W}_{n_i l_i}(\frac{k_i}{c_i}) Y^{(1_i)}(\hat{k}_i) \quad (C5.6)$$

$$W_{n_i l_i}(\frac{k_i}{c_i}) = (2\pi)^{\frac{3}{2}} i^{-l_i} R_{n_i l_i}(\frac{k_i}{c_i}) ; \tilde{W}_{n_i l_i}(\frac{k_i}{c_i}) = (\frac{1}{2\pi})^{\frac{3}{2}} W_{n_i l_i}^*(\frac{k_i}{c_i}) \quad (C5.7)$$

$$c_i := 1/a_i \quad (C5.8)$$

Vor allen anderen möglichen ist die Oszillatorbasis dadurch ausgezeichnet, dass in ihr die Separation von Schwerpunkts- und Relativkoordinaten einer N-Teilchen-Produktwellenfunktion in expliziter Form möglich ist, wobei man im Raum der Oszillatorfunktionen bleibt (Kr 66). Moshinsky (Mo 59, Br 67) leitete die Transformationsformel für die drehimpulsgekoppelte Gesamtwellenfunktion eines Systems zweier Teilchen gleicher Masse m in einen durch ω_{osz} charakterisierten Oszillatorpotential ab und berechnete die Transformationskoeffizienten:

$$(H_{n_1}^{\{11\}}(\vec{r}_1) \times H_{n_2}^{\{12\}}(\vec{r}_2))^{\{112\}} = \sum_{n\tilde{n}\tilde{l}} \langle n\tilde{n}\tilde{l}, 112 | n11n212, 112 \rangle \cdot (H_n^{\{1\}}(\vec{r}) \times H_{\tilde{n}}^{\{1\}}(\vec{R}))^{\{112\}} \quad (C5.9)$$

Hierin sind die Wellenfunktionen der Relativ- bzw. Schwerpunktsbewegung durch

$$H_n^{\{1\}}(\vec{r}) = W_{n1}(\frac{r}{a}) Y^{\{1\}}(\hat{r}) ; H_{\tilde{n}}^{\{\tilde{1}\}}(\vec{R}) = W_{\tilde{n}1}(\frac{R}{A}) Y^{\{\tilde{1}\}}(\hat{R}) \quad (C5.10)$$

$$a_1 = a_2 = (\frac{\hbar}{m \cdot \omega_{osz}})^{1/2} ; a = \sqrt{2} a_1 ; A = \frac{1}{\sqrt{2}} a_1 \quad (C5.11)$$

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 ; \vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \quad (C5.12)$$

gegeben. Ein Produkt von Einteilchenoszillatorfunktionen der Oszillatorlänge $a_1=a_2$ kann also als Superposition von Produkten aus Oszillatorfunktionen der Relativbewegung mit Oszillatorlänge a und der Schwerpunktsbewegung mit Oszillatorlänge A dargestellt werden. Die Transformationskoeffizienten (Moshinsky-Brackets) sind von magnetischen Quantenzahlen unabhängig, reell und besitzen hohe Symmetrien, sodass sich die obige Gleichung sowohl auf die adjungierten Zustände $H_{n_i}^{\{1\}}(\vec{r}_i)$ als auch auf die Fouriertransformierten überträgt, deren jeweiliger Oszillatorimpuls das Inverse der entsprechenden Oszillatorlänge ist. In knapper symbolischer Form kann man daher schreiben

$$(|\frac{11}{n1}\rangle_x |\frac{12}{n2}\rangle)^{\{112\}} = \sum_{n\tilde{n}\tilde{1}} \langle n\tilde{n}\tilde{1}, 112 | n1\tilde{1}n2\tilde{1}2, 112 \rangle (|\frac{1}{n}\rangle_x |\frac{\tilde{1}}{\tilde{n}}\rangle)^{\{112\}} \quad (C5.13)$$

Die so gewonnene Zerlegung hat grosse theoretische und praktische Bedeutung, da sie beispielsweise die Berechnung von Matrixelementen der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung, welche ja nur eine Funktion von Relativkoordinaten ist, sehr vereinfacht bzw. in vielen Fällen komplizierter Struktur überhaupt erst möglich macht.

Wir benutzen die Moshinsky-Transformation, um die Produktfunktion (C3.13) -die wir für den Fall, dass der Radialanteil durch Oszillatorfunktionen gegeben ist, mit $H_{q_1 q_2}^{\{j_{12} t_{12}\}} |>$ bezeichnen- in eine für die Berechnung von Matrixelementen günstige Form zu bringen. Dazu gehen wir von der (jj)-Kopplung zunächst zur (LS)-Kopplung über*, benutzen (C5.13), koppeln den Schwerpunktsanteil ab und erhalten so unter Berücksichtigung der Symmetrien bei der Vertauschung (1 $\leftrightarrow$ 2) im zweiten Term das Ergebnis

$$H_{q_1 q_2}^{\{j_{12} t_{12}\}} |> = \sum_{l_1 l_2 s_{12}} (1 + (-)^{l_1 + s_{12} + t_{12} + 1}) (-)^{s_{12} + j_{12} - l_{12}} \cdot$$

$$\hat{l}_{12}^2 \hat{s}_{12}^2 \hat{j}_1 \hat{j}_2 \langle n l \tilde{n} \tilde{l}, l_{12} | n_1 l_1 n_2 l_2, l_{12} \rangle \left\{ \begin{matrix} \tilde{l} & l & l_{12} \\ s_{12} & j_{12} & \tilde{j} \end{matrix} \right\} \quad (C5.14)$$

$$\left\{ \begin{matrix} l_1 & s_1 & j_1 \\ l_2 & s_2 & j_2 \\ l_{12} & s_{12} & j_{12} \end{matrix} \right\} (|\tilde{l}\rangle \times (|l\rangle \times |s_{12}\rangle) \{ \tilde{j} \}) \{ j_{12} \} |t_{12}\rangle$$

Dieser Ausdruck verschwindet für gerade Werte von (1+s₁₂+t₁₂) ; insbesondere tragen für Relativdrehimpuls l = 0 nur die Kombinationen mit s₁₂=0, t₁₂=1 und s₁₂=1, t₁₂=0 bei.

In der Kernphysik hat sich die empirische Formel

$$h\omega_{osz} = 41 A^{-1/3} \text{ MeV} \quad (C5.15)$$

sehr gut bewährt.

* Die zugehörige Umkopplungstransformation für Tensorprodukte vierter Ordnung ist im Anhang angegeben.

D. Modellabhängige Rechnungen für endliche Kerne

1. Übersicht (Ku 66)

In den vergangenen Jahren wurden verschiedene Versuche unternommen, Eigenschaften endlicher Kerne mit Hilfe der Eigenwertgleichung (B5.32) bzw. der entsprechenden reduzierten Gleichung (C4.17) zu berechnen. Die Arbeiten unterscheiden sich vor allem bezüglich der F-Matrix, für die eine verwirrende Vielzahl oft völlig willkürlich erscheinender Ansätze benutzt wurde.

Eine nullte Näherung zu F ist offensichtlich durch

$$F_{\alpha\lambda, \kappa\beta}^0(\omega) = V_{\alpha\lambda, \kappa\beta} \quad (D1.1)$$

gegeben, und damit stimmt unsere Eigenwertgleichung mit der Säkulargleichung der verallgemeinerten zeitabhängigen Hartree-Fock-Theorie (random phase approximation, quasi Boson approximation) überein (La 64). Verschiedene Autoren (Gi 64, Gi 64a, Gi 67, Fe 66) ersetzen ohne genauere Begründung V durch eine "effektive Restwechselwirkung" V_{eff} einfacher Gauß- oder Yukawa-Form. Stärken, Reichweiten und Mischungsverhältnisse der einzelnen Anteile werden als freie Parameter betrachtet und individuell für jeden Kern -oder sogar jedes Niveau- so variiert, dass theoretische und experimentelle Werte der betrachteten Systemeigenschaften optimal übereinstimmen. Eine andere Methode (Fe 65a, Ta 62) beruht darauf, die einzelnen Matrixelemente von V_{eff} als anpassbare Parameter aufzufassen, ohne dass der Versuch gemacht wird, diese aus einer expliziten Form von V_{eff} abzuleiten. Beide Verfahren sind trotz ihrer Erfolge bei der Wiedergabe experimenteller Daten vom theoretischen Standpunkt

aus unbefriedigend, da sie kaum Einsicht in die zugrunde liegenden physikalischen Tatbestände geben und wesentlich willkürlich erscheinen. Zudem hängen die numerischen Werte der gewonnenen Parameter, und damit V_{eff} , stark von dem jeweiligen Kern, den Basiszuständen und den zu beschreibenden Messwerten ab, während man eigentlich gerade umgekehrt aus einer -vom individuellen Charakter eines Kerns unabhängigen- Wechselwirkung berechnete theoretische Werte mit den experimentellen Daten vergleichen möchte. Dieses methodisch bessere Vorgehen hat in einer Arbeit (Di 68), in der V mit der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung von Tabakin (Ta 64) identifiziert wurde, gute Ergebnisse geliefert. Bei allen bisher angegebenen Rechnungen wurde die Dichte- und Energieabhängigkeit von F nicht berücksichtigt.

Erst in neuerer Zeit wird F methodisch genauer mit der renormierten K -Matrix in Leiternäherung identifiziert, d.h. man setzt wegen (C2.11) und (B5.28)

$$F_{\alpha\lambda,\kappa\beta}^1 = z_\alpha z_\kappa \tilde{K}_{\alpha\lambda,\kappa\beta}^L \left(\frac{\epsilon_\alpha + \epsilon_\beta + \epsilon_\lambda + \epsilon_\kappa}{2} - 2\mu \right) \quad (\text{D1.2})$$

In Arbeiten von Migdal und Mitarbeitern (Mi 63, Mi 64a, Mi 64b, Mi 65, Ga 58) wurde kein Versuch unternommen, K^L mittels (C2.19) aus der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung zu berechnen; lediglich im Aussenraum soll das dadurch dichteabhängige $\tilde{K}^L$ asymptotisch in die Vorwärtsstreuamplitude zweier Nukleonen übergehen. Auf der Landauschen Theorie der Fermiflüssigkeiten

(La 56, La 57, La 58) basierende Untersuchungen zur Struktur von $\tilde{K}^L$ legen wieder eine Parametrisierung nahe, welche aber diesmal über weite Bereiche des periodischen Systems gültig sein soll und wohldefinierte Symmetrien bezüglich der Spin- und Isospinvariablen besitzt. So gelingt es, mit relativ wenigen Parametern eine Vielzahl experimenteller Daten -wie Anregungsenergien, Übergangswahrscheinlichkeiten, magnetische Momente, β -Zerfall, μ -Einfang, Isotopieverschiebung- zu beschreiben (Mi 65, Ha 68, Gu 65).

Gleichung (D1.2) muss weiter vereinfacht werden, ~~bevor~~ man F aus der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung berechnen kann: Wir nehmen dazu an, dass die K renormierende Matrix in der Impulsdarstellung wesentlich diagonal ist und alle $z_{\vec{k}}$ in etwa gleich $z_{\vec{k}_F}$ sind, also

$$\langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | F^{10} | \vec{k}'_1 \vec{k}'_2 \rangle = z_{\vec{k}_F}^2 \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | K^L (\frac{\epsilon_{\vec{k}_1} + \epsilon_{\vec{k}_2} + \epsilon_{\vec{k}'_1} + \epsilon_{\vec{k}'_2}}{2} - 2\mu) | \vec{k}'_1 \vec{k}'_2 \rangle \quad (D1.3)$$

Untersuchungen von Luttinger (Lu 60, Lu 60a, Lu 60b) und Migdal (Mi 57) zeigen, dass die Impulsverteilungsfunktion $\rho_{\vec{k}}$ bei Systemen der Art (B4.36) an der Fermikante eine Unstetigkeit vom Betrage $z_{\vec{k}_F}$ hat

$$\rho_{\vec{k}_F^-} - \rho_{\vec{k}_F^+} = z_{\vec{k}_F} =: z \quad (D1.4)$$

woraus bei Kenntnis von $\rho_{\vec{k}}$ auf z oder umgekehrt geschlossen werden kann. Für die betrachteten Systeme fällt $\vec{k}_F$ mit dem Fermiimpuls $\vec{k}_F^{\sim}$ freier Teilchen zusammen. Die K^L -Matrix sollte nach (C2.19) bzw. mit den dort angegebenen Näherungen be-

stimmt werden. Bisher wurden erst einige Rechnungen in der Bruecknerschen Λ^B -Näherung veröffentlicht (Ka 64, Ku 66), die qualitative Übereinstimmung mit den Anregungsspektren des 2-Teilchen-Kerns O^{18} sowie des Teilchen-Loch-Kerns O^{16} zeigten. Wegen des recht aufwendigen Verfahrens zur Berechnung von K^L waren weitere, teilweise recht unübersichtliche Näherungen und Korrekturen notwendig. Es sei zudem daran erinnert, dass die Brueckner-Theorie ein reines Einteilchenmodell zugrunde legt, weshalb $z = 1$ ist und gerade die interessanten Abweichungen nicht erfasst werden können. Weitere Vorbehalte der Λ^B -Näherung gegenüber haben wir bereits früher angeführt.

2. Gleichungen des Modells

a) Allgemeines

Wir wollen in dieser Arbeit von der Gültigkeit der Quasiteilchenapproximation (B4.38) ausgehen und Kerneigenschaften durch Lösen der resultierenden Eigenwertgleichung (B5.32) in der reduzierten Form (C4.17) berechnen, wobei wir die Näherung (D1.3) für F zugrunde legen, $K^L(\omega)$ bezüglich der Relativkoordinaten in der Λ^{oo} -Näherung (C2.21) bestimmen und als $\hat{K}(\omega)$ bezeichnen. Alle Matrixelemente werden mit Oszillatorfunktionen (C5.1), (C5.15) berechnet. Den Parameter z betrachten wir zunächst als frei, werden aber sehen, dass er faktisch mit dem sich bei einer vergleichbaren Rechnung (We 67) aus der Impulsverteilung nach (D1.4) ergebenden Wert von 0.8 übereinstimmt.

Um die voll reduzierte Form der Eigenwertgleichung benutzen zu können, müssen wir F als skalar im Isoraum annehmen. Die dadurch bedingte Vernachlässigung aller mit der Coulombwechsel-

wirkung der Protonen eines Kerns zusammenhängenden Effekte geht als zu begründende Annahme an zwei Stellen in die Rechnungen ein: Dass Differenzen von Besetzungszahlen und Einteilchenenergien für selbstkonjugierte Kerne recht gut von den Isospinprojektionen unabhängig sind, wurde schon früher gezeigt. Weiterhin wäre die abgeschirmte Coulombkraft in der Proton-Proton-Wechselwirkung zu berücksichtigen; aus einer einfachen Überlegung (Pi 62) folgt jedoch, dass näherungsweise alle nicht-diagonalen Matrixelemente der vollen Coulombkraft verschwinden und alle Diagonalelemente etwa gleich $V_c = -1.2(e^2/r_0 A^{1/3}) = -1.4 A^{-1/3} \text{ MeV}$ sein sollten. Für $A=16$ (40) ergibt sich $V_c = -0.4 \text{ MeV}$ (-0.3 MeV). Im Vergleich zu den übrigen Diagonaltermen, die von der Grössenordnung $\geq 6 \text{ MeV}$ sind, kann man diesen Beitrag vernachlässigen. Zur Probe haben wir einige repräsentative Diagonal- und Nichtdiagonalelemente der abgeschirmten Coulomb-Wechselwirkung nach den unten angegebenen Methoden berechnet und fanden, wie auch (Ma 67), qualitative Übereinstimmung mit der obigen Abschätzung.

Die Dichteabhängigkeit von F haben wir im Sinne einer lokalen Dichtenäherung zu (C2.4) durch eine Abhängigkeit des chemischen Potentials μ von der Schwerpunktskoordinate der wechselwirkenden Nukleonen beschrieben und nehmen an, dass die Funktionswerte $\langle \vec{r} | F^1 | \vec{r} \rangle$ von F im Kerninneren aus $\hat{K}(\omega)$ mit dem Kernmateriewert $\mu_1 = 16 \text{ MeV}$ berechnet werden können, die Funktionswerte $\langle \vec{r} | F^2 | \vec{r} \rangle$ im Kernäusseren mit $\mu_2 = 0 \text{ MeV}$; eine Änderung im Energieargument ω bei diesem Übergang bleibt unberücksichtigt. Zwischen beiden Anteilen wird dann mit Hilfe der empirisch bekannten Dichteverteilung $\rho(R)$ der Nukleonen interpoliert:

$$\langle \vec{R} \vec{R} | F | \vec{R} \vec{R} \rangle = \delta(\vec{R} - \vec{R}') \sum_{i=1}^2 F^i(R) \langle \vec{r} | F^i | \vec{r} \rangle \quad (D2.1)$$

$$F^1(R) := \frac{\rho(R)}{\rho(0)} \quad ; \quad F^2(R) := 1 - F^1(R) \quad (D2.2)$$

$$\rho(R) = (1 + e^{-(r_0 A^{1/3} - R)/a_0})^{-1} \quad (D2.3)$$

Wir beschränken uns auf eine spezielle Klasse paritätserhaltender, nichtlokaler, bezüglich Gesamtspin s_{12} , Isospin $(t_{12} \tau_{12})$ und Relativdrehimpuls $(\vec{j} \ \vec{i})$ diagonalen Nukleon-Nukleon-Potentiale (Ta 64)

$$\langle \vec{r} | V^N | \vec{r} \rangle = \sum_{\substack{s_{12} t_{12} \tau_{12} \\ 1 \ 1' \ \vec{j} \ \vec{i}}} \langle \vec{r} | V_{s_{12} t_{12} \vec{j}} | \vec{r} \rangle \cdot \left[R_{1s_{12}}^{\{\vec{j} \ t12\}(\hat{r})} \right]_{\vec{i} \tau_{12}} \left[R_{1's_{12}}^{(\vec{j} \ t12)(\hat{r})} \right]_{\vec{i} \tau_{12}} \quad (D2.4)$$

$$R_{1s_{12}}^{\{\vec{j} \ t12\}(\hat{r})} := (Y^{\{1\}}(\hat{r}) \times \chi^{\{s_{12}\}}) \{\vec{j}\} \zeta^{\{t12\}} \quad (D2.5)$$

und suchen Lösungen $\hat{K}(\omega)$ von (C2.21) in der gleichen, bei Fouriertransformation invarianten Form. Übrig bleibt die entkoppelte Integralgleichung

$$\langle \underline{k} | \hat{K}_{s_{12} t_{12} \vec{j}}(\omega) | \underline{k}' \rangle = \langle \underline{k} | V_{s_{12} t_{12} \vec{j}} | \underline{k}' \rangle + \int d\underline{k} \underline{k}^2 \langle \underline{k} | V_{s_{12} t_{12} \vec{j}} | \underline{k} \rangle \frac{1}{\omega + 2\mu - \frac{K^2}{4m^*} - \frac{k^2}{m^*}} \langle \underline{k} | \hat{K}_{s_{12} t_{12} \vec{j}}(\omega) | \underline{k}' \rangle \quad (D2.6)$$

die sich für separable Potentiale auf eine einfache algebraische Gleichung reduziert. Aus unserem Ansatz

$$\langle \vec{R} \vec{R} | F | \vec{R} \vec{R} \rangle = \delta(\vec{R} - \vec{R}') \sum_{i=1}^2 F^i(R) \sum_{\substack{s_{12} t_{12} \tau_{12} \\ 1 \ 1' \ j \ \tilde{j}}} z^2 \langle r | \hat{K}_{s_{12} t_{12} \tau_{12}}^i \tilde{j}^{(\omega)} | r' \rangle \cdot$$

$$\left[R_{1 s_{12}}^{\{j \ t_{12}\}}(r) \right]_{\tilde{j} \tau_{12}} \left[R_{1' s_{12}}^{(j \ t_{12})}(r') \right]_{\tilde{j} \tau_{12}} \quad (D2.7)$$

und dem daraus durch teilweise Fouriertransformation sowie aus der Definition des Skalarprodukts in $j_{\{2\}}$ folgenden Zwischenergebnis

$$\langle t'_{12} \tau'_{12} | \left[\left(\langle \tilde{l}' | x \langle \frac{1'}{n} | x \langle s'_{12} | \right) \{j'\} \right)_{j'_{12} l'_{12}} F \left(| \frac{\tilde{l}}{n} \rangle x \left(| \frac{1}{n} \rangle x | s_{12} \rangle \right) \{j\} \right]_{j_{12} l_{12}} \overline{t_{12} \tau_{12}} \rangle$$

$$= z^2 \delta_{j_{12} j'_{12}} \delta_{l_{12} l'_{12}} \delta_{s_{12} s'_{12}} \delta_{t_{12} t'_{12}} \delta_{\tau_{12} \tau'_{12}} \delta_{j j'} \delta_{\tilde{l} \tilde{l}'} \cdot$$

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \langle \frac{\tilde{l}}{n} | F^i | \frac{\tilde{l}}{n} \rangle \langle \frac{1'}{n} | \hat{K}_{s_{12} t_{12} \tau_{12}}^i \tilde{j}^{(\omega)} | \frac{1}{n} \rangle \quad (D2.8)$$

mit

$$\langle \frac{\tilde{l}}{n} | F^i | \frac{\tilde{l}}{n} \rangle := \int dR R^2 \tilde{W}_{\tilde{n} \tilde{l}} \left(\frac{R}{A} \right) F^i(R) W_{\tilde{n} \tilde{l}} \left(\frac{R}{A} \right) \quad (D2.9)$$

$$\langle \frac{1'}{n} | \hat{K}_{s_{12} t_{12} \tau_{12}}^i \tilde{j}^{(\omega)} | \frac{1}{n} \rangle := \int dk dk' k^2 k'^2 \tilde{W}_{n' l'} \left(\frac{k'}{c} \right) \langle k' | \hat{K}_{s_{12} t_{12} \tau_{12}}^i \tilde{j}^{(\omega)} | k \rangle W_{n l} \left(\frac{k}{c} \right) \quad (D2.10)$$

erhält man unter Benutzung von (C5.14) für Matrixelemente in der Oszillatorbasis die Formel

$$\begin{aligned}
 < |H_{q1q2,j_{12}l_{12}t_{12}\tau_{12}}^{FH+} q3q4,j_{34}l_{34}t_{34}\tau_{34} | > = z^2 \delta_{j_{12}j_{34}} \delta_{l_{12}l_{34}} \cdot \\
 & \delta_{t_{12}t_{34}} \delta_{\tau_{12}\tau_{34}} \sum_{\substack{l_{12}l_{34}s_{12} \\ n'l\tilde{n}\tilde{l}\tilde{s}}} \sum_{i=1}^2 (1+(-)^{l+s_{12}+t_{12}+1}) (-)^{l_{12}+l_{34}} \cdot \\
 & \hat{l}_{12}^2 \hat{l}_{34}^2 \hat{j}_{12}^2 \hat{s}_{12}^2 \hat{j}_1 \hat{j}_2 \hat{j}_3 \hat{j}_4 \begin{Bmatrix} l_1 & s_1 & j_1 \\ l_2 & s_2 & j_2 \\ l_{12} & s_{12} & j_{12} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_3 & s_3 & j_3 \\ l_4 & s_4 & j_4 \\ l_{34} & s_{12} & j_{12} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \tilde{l} & l' & l_{12} \\ s_{12} & j_{12} & j \end{Bmatrix} \cdot \\
 & \begin{Bmatrix} \tilde{l} & l & l_{34} \\ s_{12} & j_{12} & j \end{Bmatrix} < n'l\tilde{n}\tilde{l}, l_{12} | n_1 l_1 n_2 l_2, l_{12} > < n'l\tilde{n}\tilde{l}, l_{34} | n_3 l_3 n_4 l_4, l_{34} > \cdot \\
 & < \tilde{l} | F^i | \tilde{n} > < l' | \hat{K}_{s_{12}t_{12}j}^i(\omega) | l_n >
 \end{aligned} \tag{D2.11}$$

Falls $\hat{K}(\omega)$ in l diagonal und von j unabhängig ist, also für

$$< l' | \hat{K}_{s_{12}t_{12}j}^i(\omega) | l_n > = \delta_{ll'} < l' | \hat{K}_{s_{12}t_{12}}^i(\omega) | l_n > \tag{D2.12}$$

so folgt daraus

$$\begin{aligned}
 < |H_{q1q2,j_{12}l_{12}t_{12}\tau_{12}}^{FH+} q3q4,j_{34}l_{34}t_{34}\tau_{34} | > = z^2 \delta_{j_{12}j_{34}} \delta_{l_{12}l_{34}} \cdot \\
 & \delta_{t_{12}t_{34}} \delta_{\tau_{12}\tau_{34}} \sum_{\substack{l_{12}l_{34}s_{12} \\ n'l\tilde{n}\tilde{l}}} \sum_{i=1}^2 (1+(-)^{l+s_{12}+t_{12}+1}) \hat{l}_{12}^2 \hat{s}_{12}^2 \hat{j}_1 \hat{j}_2 \hat{j}_3 \hat{j}_4 \cdot \\
 & \begin{Bmatrix} l_1 & s_1 & j_1 \\ l_2 & s_2 & j_2 \\ l_{12} & s_{12} & j_{12} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_3 & s_3 & j_3 \\ l_4 & s_4 & j_4 \\ l_{34} & s_{12} & j_{12} \end{Bmatrix} < n'l\tilde{n}\tilde{l}, l_{12} | n_1 l_1 n_2 l_2, l_{12} > \cdot \\
 & < n'l\tilde{n}\tilde{l}, l_{34} | n_3 l_3 n_4 l_4, l_{34} > < \tilde{l} | F^i | \tilde{n} > < l' | \hat{K}_{s_{12}t_{12}}^i(\omega) | l_n >
 \end{aligned} \tag{D2.13}$$

Aus der Definition (C3.28) der ungekoppelten Matrixelemente erhält man die vorläufige Endformel

$$\langle\langle q_1 q_2 || F_{jt} || q_3 q_4 \rangle\rangle =$$

$$z^2 \sum_{\substack{j_{12} t_{12} i_{12} s_{12} \\ n \ n' \ 1 \ \tilde{n} \ \tilde{n}' \ 1 \\ i=1,2}} (-)^{j_1+j_2-j_{12}-t_{12}+1} (1+(-)^{1+s_{12}+t_{12}+1}).$$

$$\hat{j}_{12}^2 \hat{t}_{12}^2 \hat{l}_{12}^2 \hat{s}_{12}^2 \hat{j}_1 \hat{j}_2 \hat{j}_3 \hat{j}_4 \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_4 & j_3 & j_{12} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 1/2 & 1/2 & t_{12} \\ 1/2 & 1/2 & t_{12} \end{matrix} \right\} \cdot$$

$$\left\{ \begin{matrix} l_1 & s_1 & j_1 \\ l_2 & s_2 & j_2 \\ l_{12} & s_{12} & j_{12} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_3 & s_3 & j_3 \\ l_4 & s_4 & j_4 \\ l_{12} & s_{12} & j_{12} \end{matrix} \right\} \langle n l \tilde{n} \tilde{l}, l_{12} | n_1 l_1 n_2 l_2, l_{12} \rangle \quad (D2.14)$$

$$\langle n l \tilde{n} \tilde{l}, l_{12} | n_3 l_3 n_4 l_4, l_{12} \rangle \langle \tilde{l} | F^i | \tilde{l} \rangle \langle \frac{1}{n} | \hat{K}_{s_{12} t_{12}}^i(\omega) | \frac{1}{n} \rangle$$

Das Energieargument ω berechnen wir entsprechend (D1.2) aus den experimentellen Neutronen-Einteilchenenergien und identifizieren dabei μ mit der Einteilchenenergie $\epsilon_{\max}$ des obersten besetzten Neutronen- oder Protonenzustandes:

$$\omega = \frac{1}{2} (\epsilon_{q1,1/2} + \epsilon_{q2,1/2} + \epsilon_{q3,1/2} + \epsilon_{q4,1/2} - 4\epsilon_{\max}) \quad (D2.15)$$

In den obigen Formeln tritt eine Teilsumme

$$S := \sum_{j_{12}} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_4 & j_3 & j_{12} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_1 & s_1 & j_1 \\ l_2 & s_2 & j_2 \\ l_{12} & s_{12} & j_{12} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_3 & s_3 & j_3 \\ l_4 & s_4 & j_4 \\ l_{12} & s_{12} & j_{12} \end{matrix} \right\} j_{12}^2 (-)^{j_{12}} \quad (D2.16)$$

auf, die mit den graphischen Methoden von (Ju 63) analysiert wurde. Es zeigte sich, dass S einem speziellen 15-j-Symbol

Wir führen noch die Fouriertransformierten an:

$$\frac{\langle k | V_S | k' \rangle}{4\pi} = \left\{ -\frac{\lambda_S}{m^*} V_1^S(k) V_1^S(k') + \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{\lambda}{m^*} V_2^S(k) V_2^S(k') \right\} \quad (D2.19)$$

$$V_1^S(k) := \frac{1}{k^2 + \alpha_S^2} \quad ; \quad V_2^S(k) := \frac{\sin(kR_S)}{k}$$

Dieses Potential erlaubt eine explizite Angabe von $\hat{K}(\omega)$ und hat sich zudem bei Kernmaterierechnungen bewährt (Pu 61, Re 63).

Nach Auswertung der in (D2.6) auftretenden Integrale mit Hilfe des Residuensatzes erhält man durch einfache algebraische Methoden

$$\frac{\langle k | \hat{K}_S^i(\omega) | k' \rangle}{4\pi} = \sum_{a,b=1}^2 D_{ab}^S(\gamma_i) V_a^S(k) V_b^S(k')$$

$$D^S = -\frac{1}{E} \cdot \left[\begin{array}{c} \gamma \left(1 - \frac{\lambda_S \pi^2}{\alpha_S (\alpha_S + \gamma)^2} \right) \\ \frac{\pi^2 (1 - e^{-(2\gamma R_S)})}{\alpha_S^2 (\alpha_S + \gamma)^2} \end{array} \quad - \quad \frac{2\gamma \lambda_S (e^{-\gamma R_S} - e^{-\alpha_S R_S})}{(\alpha_S^2 - \gamma^2) (1 - e^{-2\gamma R_S})} \right]$$

$\swarrow$ λ_S

$$E = m^* \left\{ 1 - \frac{\lambda_S \pi^2}{\alpha_S (\alpha_S + \gamma)^2} \left(1 - \frac{4\alpha_S \gamma (e^{-\gamma R_S} - e^{-\alpha_S R_S})^2}{(\alpha_S - \gamma)^2 (1 - e^{-2\gamma R_S})} \right) \right\}$$

(D2.20)

$$\gamma_i = \begin{cases} \sqrt{-m^* \Omega_i} & , \text{ für } m^* \Omega_i \text{ reell } < 0 \\ -i\Gamma_i & , \text{ für } m^* \Omega_i = \Gamma_i^2 + i0 \quad , \quad \Gamma_i \text{ reell } > 0 \end{cases}$$

Hierin ist

$$\Omega_i = \omega + 2\mu_i - \frac{K^2}{4m^*} \quad (D2.21)$$

zu setzen. Andererseits stellt obige Gleichung für

$$\Omega = \frac{k^2}{m^*} + i0 \quad (D2.22)$$

die Lösung des Nukleon-Nukleon-Streuproblems dar und es lassen sich aus ihr Formeln für Streulänge, effektive Reichweite, Streuphasen bei hohen Energien und Bindungsenergie des Deuterons ableiten, wodurch die Bestimmung der Potentialparameter λ_S, α_S und R_S aus Streudaten möglich wird (Pu 61). In unseren Rechnungen haben wir die bei (Re 63) angegebenen Werte dieser Parameter benutzt (s. Tabelle 1).

3. Lösungsmethode:

Es stand eine Grossrechenanlage IBM 7090 zur Verfügung. Hauptaufgabe war, zunächst die umgekoppelten Matrixelemente (D2.14) mit der oben angegebenen Form von $\hat{K}$ zu berechnen. Wegen $l=0$ ist $\tilde{l}=l_{12}$ zu setzen und alle Matrixelemente werden reell. Integrale haben wir, je nach dem Typ des Integranden, durch (5 x 10)-Punkt-Gauß-Integration, bzw. 15-Punkt-Laguerre- oder Hermite-Integration (St 66) ausgerechnet, Moshinsky-Brackets, 6-j-Symbole und 9-j-Symbole mit einem von K.T.R. Davies (Ba 66) in Oak Ridge entwickelten Programm. Die Eigenwerte der sich ergebenden, nichtsymmetrischen Matrix C in (C4.21) erhielten wir, nach Vorschalten einer Ähnlichkeitstransformation auf obere Hessenbergform, durch die doppelte

QR-Iteration von Francis (Fr 61, Fr 62, Wi 65) -eine der modernsten, schnellsten und sichersten heute verfügbaren Methoden-, wobei auch komplexe Lösungen zugelassen werden. Für alle reellen, positiven Eigenwerte benutzen wir Wielandts inverse Iteration in der verbesserten Form von (Wa 66) zur Bestimmung der zugehörigen Eigenvektoren.

Da zur Berechnung eines einzigen Matrixelements über 9 Indizes summiert werden muss, ist eine möglichst ökonomische Anordnung der Summanden unerlässlich; zudem sollte eine Mehrfachausrechnung desselben Ausdrucks vermieden werden. Deshalb haben wir bei den besonders zeitraubenden ($l=0$)-Moshinsky-Brackets folgenden Weg eingeschlagen: Die 7 Indizes dieser Koeffizienten können nach Vorgabe einer bestimmten Reihenfolge und unter Ausnutzung aller Symmetrien eineindeutig und lückenlos auf die Menge der natürlichen Zahlen $1 \dots N_{\max}$ abgebildet werden. Es ist prinzipiell einfach, aber ausserordentlich langwierig und aufwendig, die expliziten Formeln für diese Zuordnung abzuleiten; das Ergebnis kann aus Platzgründen hier nicht angegeben werden. Dabei zeigt sich, dass es nur eine erstaunlich geringe Anzahl nichtverschwindender, voneinander verschiedener Brackets gibt.* Diese werden deshalb ein für alle Mal ausgerechnet und abgespeichert, sodass sich die Berechnung eines ($l=0$)-Transformationskoeffizienten auf die etwa $2 \cdot 10^3$ -fach schnellere Bestimmung des zugehörigen Speicherindex reduziert. In gleicher Weise haben wir auch alle vorkommenden 9-j-Symbole

* Sei $(2n_i + 1_i) \leq E_{\max}$. Für $E_{\max} = 5$ ist $N_{\max} = 465$,
für $E_{\max} = 7$ ist $N_{\max} = 1921$.

und die Integrale der K-Matrix einmal ausgerechnet und zur weiteren Verwendung abgespeichert. Nur so war es überhaupt möglich, die numerische Probleme mit einem vertretbaren Aufwand an Rechenzeit zu lösen.

Aus Gründen der Speicherkapazität waren wir trotz Anwendung von overlay-Techniken nur in der Lage, Matrizen der maximalen Dimension (36 x 36) zu verarbeiten. Nach einer einmaligen Initialisierungszeit von ca. 30 sec. beträgt die Rechenzeit für jedes der $\frac{N}{2} (\frac{N}{2} + 1)$ unabhängigen Elemente der (N x N)-Matrix C etwa 0.6 sec., wogegen die Berechnung der Eigenwerte und Eigenvektoren zeitlich kaum ins Gewicht fällt.

E. Ergebnisse und Diskussion

Um die Verträglichkeit des angegebenen Modells mit experimentellen Daten zu überprüfen, haben wir angeregte Niveaux und Dichtematrixelemente der doppelt magischen Kerne O^{16} und Ca^{40} berechnet. Wir hoffen, so diejenigen Zustände zu beschreiben, die sich als Superposition von Ein-Teilchen-Ein-Loch-Anregungen* aus dem Grundzustand deuten lassen, also verschiedene niedrige Zustände negativer Parität, bei denen Zwei-Teilchen-Zwei-Loch-Anregungen keine Rolle spielen und erst Drei-Teilchen-Drei-Loch-Zustände Konfigurationsmischungen erzeugen können. Nicht erfasst werden natürlich reine oder beigemischte Systemzustände anderen Typs, wie n-Teilchen-n-Loch-Anregungen für n grösser als 1, Rotationszustände usw.

Die Ergebnisse der Rechnungen hängen deutlich von den eingegebenen Ein-Teilchen-Energien ab. Diese haben wir, da uns die bisherigen Werte aus der Hartree-Fock-Methode (Ke 66, Gu 68) noch nicht zuverlässig genug erschienen, der üblichen Auffassung folgend aus den Spektren der $(A+1)$ -Teilchen-Kerne entnommen - bei (Jo 63, Ma 67, Da 68) für O^{16} , bei (Di 68) für Ca^{40} -, was den weiteren Vorteil hat, dass unsere Ergebnisse mit denen ähnlicher Rechnungen verglichen werden können. Für Ca^{40} standen uns zudem Ein-Teilchen-Energien eines modernen, nichtlokalen Schalenmodellpotentials (Me 65) zur Verfügung (Ul 68).

* Den Präfix "n-Teilchen-n-Loch-" kürzen wir in der Folge oft mit "np-nh-" ab.

Wie bereits erwähnt, wird der Wert des Renormierungsfaktors z , des einzigen noch nicht völlig fixierten Parameters der Theorie, durch Kernmaterierechnungen auf ungefähr 0.8 festgelegt. Wir haben z zwischen 0.7 und 0.85 variiert und die Abhängigkeit der Ergebnisse untersucht (Abbildungen 1 und 2) : Lediglich die tiefliegenden komplexen 3^- -und 5^- -Niveaux mit $T=0$ ändern sich deutlich, alle anderen bleiben faktisch konstant. Die niedrigste, gewichtete quadratische Abweichung

$$Q := \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n \frac{(E_{\text{exp}}^i - E_{\text{theor}}^i)^2}{E_{\text{exp}}} \quad (\text{E.1})$$

erhielten wir für O^{16} mit einem Wert von $z=0.795$ und für Ca^{40} mit $z=0.81$. Diese bemerkenswert gute Übereinstimmung der beiden z -Werte untereinander und mit dem in etwa erwarteten Wert bedingt, dass wir unser Modell als faktisch parameterfrei bezeichnen können. Alle in den Tabellen und Abbildungen angegebenen Zahlen wurden mit $z=0.80$ berechnet.

Eine Zusammenstellung der Eingabedaten findet man in den Tabellen 1 und 2.

1. Teilchen-Loch-Anregungen in O^{16}

Erste Berechnungen (Br 61) von O^{16} -Anregungszuständen negativer Parität in einer $1p-1h$ -Basis wurden unter Zugrundelegung einer deltaförmigen und später (Gi 64) einer endlich-reichweitigen "effektiven Kestwechselwirkung" V_{eff} durchgeführt. Kallio

und Kolltveit (Ka 64, abgekürzt KK) leiteten F im Rahmen der Brueckner-Theorie aus einer einfachen, zentralen Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung ab, Mavromatis und Markiewicz (Ma 67) haben dieses Verfahren dann auf das Hamada-Johnston-Potential (abgekürzt HJP) angewandt, während Hacker und Mikeska (Ha 68) die Migdalsche Parametrisierung von F benutzten. Die von uns berechneten Anregungsenergien sowie zum Vergleich die Ergebnisse der drei letztgenannten Arbeiten sind in Tabelle 3a und Abbildung 3 zusammen mit den sich in einem reinen Ein-Teilchen-Modell aus den experimentellen Ein-Teilchen-Energien ergebenden Niveaux eingetragen, die nach (C4.23) normierten Eigenvektoren U und W , deren betragsgrösster Komponente wir stets ein positives Vorzeichen zuordneten, finden sich für die jeweils niedrigsten Eigenwerte in Tabelle 3b. Dort haben wir auch die durch das Quadrat der betragsgrössten Komponente dividierte Summe der Komponentenquadrate angegeben, deren Wert

$$k := \frac{1}{a_{\max}^2} \sum_i a_i^2 \quad (\text{E.2})$$

ein Mass für die Reinheit eines angeregten Zustands im Sinne einer $1p-1h$ -Anregung aus dem Grundzustand darstellt.

Bei der Besprechung des experimentellen bzw. berechneten Spektrums von O^{16} können wir uns auf Untersuchungen von Zamick (Za 65) sowie Brown und Green (Br 65a) stützen, in denen die Lage von $3p-3h$ -Konfigurationen und die Möglichkeit einer Beimischung zu $1p-1h$ -Zuständen diskutiert werden.

Betrachten wir als erstes die ($T=0$)-Zustände : Deutlich erkennt man die typische starke Absenkung der experimentellen Niveaux um etwa 5 MeV gegenüber den Ein-Teilchen-Modell-Werten, wohingegen das berechnete Spektrum als zu schwach abgesenkt erscheint.

Der niedrigste berechnete ($0^-, T=0$)-Zustand bei 12.92 MeV weicht fast genau 2 MeV vom experimentellen Wert 10.94 MeV ab und liegt damit etwa 0.5 MeV unter dem Ergebnis von KK, während das HJP einen um 1 MeV zu niedrigen Wert liefert. Wir vermuten daher, dass eine aufwendigere Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung als die hier benutzte dieses Niveau gut wiedergeben könnte und lesen aus dem zugehörigen Eigenvektor ab, dass es sich um eine einfache $1p-1h$ -Anregung handelt.

Bemerkenswerterweise ergaben sich in allen früheren wie auch den jetzigen Rechnungen niemals drei ($1^-, T=0$)-Anregungen unterhalb von 16-18 MeV, während solche Niveaux bei 7.12 , 9.58 und 12.43 MeV beobachtet werden. Eine Erklärung hierfür scheint das Auftreten von $3p-3h$ -Zuständen in diesem Energiebereich (Za 65) zu liefern, welche stark mit den $1p-1h$ -Zuständen mischen (Br 65a) und insbesondere in den beiden niedrigsten beobachteten Anregungen etwa gleich stark vertreten sind. Somit ergeben sich die Niveaux bei 7.12 MeV und 9.58 MeV durch Aufspaltung von stark interferierenden $1p-1h$ - und $3p-3h$ -Zuständen der etwa gleichen Energie 8.3 MeV. Diesen Sachverhalt haben wir in Abbildung 3 angedeutet. Noch immer weicht der von uns berechnete Wert deutlich zu höheren Energien hin ab, zeigt aber zumindest eine gewisse Absenkung gegenüber der Ein-Teilchen-Modell-Energie. Der zugehörige

k-Faktor weist das berechnete Niveau als komplexe Überlagerung verschiedener lp-lh-Anregungen aus, in denen die $(2s_{1/2}1p_{1/2})^{-1}$ -Komponente überwiegt. Selbst unter der Annahme starker 3p-3h-Beimischungen scheint dagegen das 12.45 MeV-Niveau nicht erklärbar zu sein, da der zweite 3p-3h-Zustand bei 14-15 MeV einen ungewöhnlich grossen Überlapp mit dem nächsten lp-lh-Zustand bei 16.73 MeV aufweisen müsste.

Auch die Diskrepanz zwischen dem berechneten $(2^-, T=0)$ -Spektrum und den experimentellen Daten scheint ähnlich erklärbar zu sein (Ma 67) : Die beiden niedrigsten beobachteten Anregungen ergeben sich vermutlich durch Mischung eines lp-lh-Zustandes bei ungefähr 12 MeV mit einem 3p-3h-Zustand bei etwa 9.5 MeV. Somit hätte die 8.88 MeV-Anregung hauptsächlich 3p-3h-Komponenten, was durch ihre Nichtauffindbarkeit in den $O^{16}(p,p')O^{16}$ -Experimenten von Hasselgreen et al. (Ha 65) gestützt wird, und die 12.52 MeV-Anregung wäre in etwa mit dem von uns berechneten niedrigsten Zustand bei 11.95 MeV zu identifizieren. Mavromatis et al. (Ma 67) deuten das dritte beobachtete Niveau bei 13.97 MeV als Teil einer zweiten (3p-3h, K=1)-Rotationsbande, deren Kopf die $(1^-, T=0)$ -Anregung von 12.43 MeV darstellt.

Bei den $(3^-, T=0)$ -Anregungen ergibt sich ein ähnliches Bild : Extrapoliert man die in den (J=1)- und (J=2)-Spektren eingeführten 3p-3h-Zustände bei 8.3 MeV und 9.5 MeV als Teile einer Rotationsbande nach J=3, so liegt es nahe, einen weiteren 3p-3h-Zustand bei 11.5 MeV zu vermuten. Dieser mischt mit einer lp-lh-Anregung bei etwa 6.5 MeV, wodurch sich die experimentell

gefundenen Niveaux bei 6.14 MeV und 11.62 MeV erklären (Br 65a). Das von uns bei 6.58 MeV berechnete Niveau stimmt also sehr gut, in der Tat besser als in den vergleichbaren Arbeiten, mit dem erwarteten Wert überein. Sein k-Wert kennzeichnet es als komplexe Mischung verschiedener lp-lh-Anregungen aus dem Grundzustand. Höhere (3^- , T=0)-Zustände vom lp-lh-Typ konnten experimentell noch nicht identifiziert werden.

Wir haben auch ein (4^- , T=0)-Niveau berechnet, für das noch keine Messwerte vorliegen.

Übersichtlicher ist die Situation bei den (T=1)-Anregungen von O^{16} , die kaum Beimischungen von 3p-3h-Komponenten erhalten: Alle experimentellen Niveaux sind gegenüber den Ein-Teilchen-Modell-Werten deutlich angehoben und unsere Ergebnisse zeigen einen etwas verstärkten Effekt solcher Art, da sie zwischen 0.3 MeV und etwa 1 MeV zu hoch liegen. Diese Abweichung empfinden wir als vertretbar, vor allem, da sich in ähnlichen Rechnungen (Ma 67) zeigte, dass die exakte Berücksichtigung der Coulombeffekte alle (T=1)-Niveaux etwa gleichmässig um ca. 0.5 MeV absenkt. Die k-Werte der Eigenvektoren weisen alle Zustände als relativ reine lp-lh-Anregungen aus dem Grundzustand aus. Um etwa 2 MeV nach oben verschoben erscheint die Lage der (1^- , T=1)-Riesenresonanzen bei etwa 22 und 25 MeV. Eine bessere Ubereinstimmung kann man bei so hohen Anregungsenergien wohl kaum erwarten, da in diesem Bereich die bei der Ableitung der Gleichungen des Modells gemachten Näherungen sicher nicht mehr gut erfüllt sind.

Die vorliegende Berechnung des Spektrums von O^{16} betrachten wir als in dem Sinne erfolgreich, dass sich für $T=1$ gewöhnlich dort ein $1p-1h$ -Zustand ergibt, wo experimentell Anregungen dieses Typs vermutet werden, während wir andererseits die $1p-1h$ -Komponenten von $(T=0)$ -Zuständen, in denen sich starke $3p-3h$ -Beimischungen bemerkbar machen, im allgemeinen relativ gut angeben können. Zum quantitativen Vergleich mit den Arbeiten anderer Autoren benutzen wir die in (E.1) definierte quadratische Abweichung Q und berücksichtigen die niedrigsten, experimentell gesicherten Anregungszustände.* Mit $Q=0.27$ liegen unsere Ergebnisse etwa in der Mitte zwischen dem HJP-Wert von $Q=0.20$ und dem KK-Wert von $Q=0.36$. Dies betrachten wir als einen Erfolg unseres Modells, da durch diese Methode eine deutliche Verbesserung gegenüber den mit dem ähnlich einfachen KK-Potential berechneten Niveaux erzielt wurde. Insbesondere die Lage des sehr stark abgesenkten niedrigsten $(3^-, T=0)$ -Zustands können wir sehr gut wiedergeben, wohingegen die aus der Migdal-Parametrisierung dafür berechnete Anregungsenergie von 11.5-13.5 MeV ausgesprochen stark vom experimentellen Wert abweicht. Vermutlich könnten wir eine weitere Verbesserung der Ergebnisse erzielen, wenn wir von einem Nukleon-Nukleon-Potential ähnlicher Güte wie das Hamada-Johnston-Potential ausgingen.

* $J=0,2,3$ für $T=0$; $J=0,1,2,3$ für $T=1$.

2. Teilchen-Loch-Anregungen in Ca^{40}

Berechnungen von Ca^{40} -Anregungszuständen negativer Parität in einer lp-lh-Basis wurden zuerst von Gillet und Mitarbeitern (Gi 64a) mit der bereits erwähnten "effektiven Restwechselwirkung" durchgeführt. Dieperink et al. (Di 68) identifizierten F mit der freien Tabakin-Wechselwirkung der Nukleonen, Birbrair et al. (Bi 67) legten dafür die Migdalsche Parametrisierung zu Grunde. Die von uns berechneten Anregungsenergien sowie die Ergebnisse der beiden letztgenannten Arbeiten sind in Tabelle 4a und Abbildung 4, die normierten Eigenvektoren mit den zugehörigen k-Werten in Tabelle 4b angegeben.

Tabelle 2 zeigt, dass die Schalenmodell-Ein-Teilchen-Energien in dem für uns wichtigen Bereich -vermutlich infolge einer zu gross angenommenen Nichtlokalitätsreichweite (Ul 68)- gegenüber den experimentellen Werten zu weit auseinandergespreizt sind, wodurch die berechneten Niveaux deutlich angehoben werden. Wir sind sicher, in den aus experimentellen Daten abgeleiteten Zahlen einen besseren Satz von Ein-Teilchen-Energien zu besitzen und werden uns im folgenden auf die Diskussion der damit sich ergebenden Resultate beschränken.

Anregungszustände positiver Parität in Ca^{40} können unter der Annahme starker Beimischungen von tiefliegenden 2p-2h- und 4p-4h-Konfigurationen erklärt werden (Ge 67). Wir vermuten, dass sich entsprechend starke 3p-3h-Effekte in den Anregungen negativer Parität bemerkbar machen und haben, da uns keine genaueren Untersuchungen dazu bekannt sind, aus den bei (Ge 67) angegebenen Zahlen für 3p-3h-Zustände interpoliert. Wir erwarten

in dieser sehr groben Abschätzung die niedrigsten 3p-3h-Niveaux für $J=1,2,3,4$ und 5 bei 5 MeV, 5.5 MeV, 6 MeV, 6.5 MeV und 7.5 MeV. Aussagen über die Möglichkeit von Konfigurationsmischungen können wir nicht machen.

Betrachten wir wieder zunächst die $(T=0)$ -Zustände : Im Mittel ist die Übereinstimmung zwischen experimentellen und berechneten Werten besser als bei O^{16} , sodass wir vermuten, Anregungen von Ca^{40} richtiger im lp-lh-Bild beschreiben zu können.

Die Lage aller $(0^-, T=0)$ -Zustände ist noch unbestimmt, als niedrigstes kommt vielleicht das 7.3 MeV-Niveau unbekannter Parität in Frage. Wir berechnen die tiefste Anregung, in qualitativer Übereinstimmung mit Gillet (Gi 64a) bei 9.96 MeV, während sie von (Di 68) bei 7.5 MeV vorausgesagt wird.

Der bei 5.9 MeV beobachtete niedrigste $(1^-, T=0)$ -Zustand scheint überwiegend 3p-3h-Komponenten aufzuweisen (Di 68), was auch mit der oben angegebenen Abschätzung verträglich ist. Deshalb identifizieren wir das von uns berechnete tiefste Niveau bei 8.67 MeV mit der experimentellen 6.95 MeV-Anregung und lesen aus dem k-Wert des zugehörigen Eigenvektors ab, dass es sich um eine komplexe Superposition vieler lp-lh-Zustände handelt. In qualitativer Übereinstimmung mit den Ergebnissen von (Di 68) erhalten wir die beiden nächsthöheren Zustände bei 10.09 MeV und 10.39 MeV und vermuten, dass sie den in $(p-\gamma)$ -Experimenten beobachteten $(J=1)$ -Resonanzen bei 9.61 MeV und 10.33 MeV entsprechen (Di 68).

Eine Klassifizierung der (2^- , $T=0$)-Zustände konnte experimentell noch nicht klar angegeben werden. Als niedrigstes kommen das 6.03 MeV-Niveau, das vermutlich überwiegend 3p-3h-Komponenten besitzt, sowie das Niveau bei 7.47 MeV in Frage, das als 1p-1h-Zustand deutbar sein sollte (Di 68). Diese Auffassung wird auch durch unser Ergebnis von 7.93 gestützt.

Relativ gut mit dem experimentellen 3.73 MeV-Niveau stimmt der niedrigste berechnete (3^- , $T=0$)-Zustand bei 3.55 MeV überein. Er erweist sich auf Grund seines aussergewöhnlich grossen k -Wertes als komplexe Überlagerung verschiedener 1p-1h-Anregungen. Die Energie des nächsthöheren Zustandes beträgt 7.92 MeV und somit scheinen die beobachteten Niveaux bei 6.28 MeV und 6.59 MeV nur durch die Annahme starker Beimischungen der 3p-3h-Anregung bei etwa 6 MeV deutbar zu sein.

Das berechnete (4^- , $T=0$)-Spektrum weist wieder einen im Vergleich zum Experiment zu hohen niedrigsten Zustand bei 7.28 MeV auf. Auch hier vermuten wir, dass eine 3p-3h-Konfiguration der Energie 6.5 MeV die Diskrepanz erklären könnte. Hierin bestärkt uns auch die Tatsache, dass die Lage dieses Niveaux sich als von der Stärke der Wechselwirkung nahezu unabhängig erwies und sehr gut mit dem Wert von (Di 68) übereinstimmt.

Das niedrigste beobachtete (5^- , $T=0$)-Niveau bei 4.49 MeV wird durch unseren Wert von 5.63 MeV vergleichsweise schlecht wiedergegeben, vor allem da die bei 7.5 MeV vermutete 3p-3h-Anregung vermutlich ohne grossen Einfluss bleibt.

Wieder sind die Ergebnisse für die $(T=1)$ -Zustände in Ca^{40} wesentlich besser : Die Abweichungen zwischen berechneten und experimentellen Energien betragen zwischen 0.0 MeV und 0.4 MeV.

Zusammenfassend können wir die vorliegende Berechnung der $1p-1h$ -Zustände in Ca^{40} als im gleichen Sinne erfolgreich und quantitativ besser als für O^{16} bezeichnen. Das lesen wir wieder an der quadratischen Abweichung Q von den niedrigsten beobachteten Anregungszuständen* ab. Übereinstimmend ergibt sich für die mit der Tabakin-Wechselwirkung berechneten Werte von (Di 68) wie auch für unsere Ergebnisse $Q=0.14$, was wir im Hinblick auf das von uns benutzte, einfache Nukleon-Nukleon-Potential als einen Erfolg der angewandten Methoden betrachten.

* $J=3,4,5$ für $T=0$; $J=2,3,4,5$ für $T=1$.

3. Zusammenfassung

Ausgehend von einer exakten Vielkörpertheorie haben wir eine Eigenwertgleichung abgeleitet, die eine Berechnung bestimmter Anregungszustände von Fermionen-Systemen gestatten sollte. Nach Spezialisierung auf für Atomkerne gültige Näherungen liessen sich die resultierenden Beziehungen für räumliche homogene Systeme vereinfachen; die Berücksichtigung des Drehverhaltens endlicher Kerne in R^3 und im Isoraum erlaubte weitere Reduktionen und die Zuordnung von Systemquantenzahlen zu Quantenzahlen von Zwei-Teilchen-Zuständen. Aus einer einfachen, mit Streu- und Deuteron-Daten verträglichen Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung haben wir dann die in die Gleichungen eingehende, renormierte effektive Zwei-Teilchen-Wechselwirkung F faktisch parameterfrei durch Lösen einer Integralgleichung und Interpolation bestimmt. So war es möglich, die als Ein-Teilchen-Ein-Loch-Anregungen aus dem Grundzustand interpretierbaren angeregten Niveaux der doppelt magischen Kerne O^{16} und Ca^{40} in -mit Rücksicht auf die Einfachheit des angesetzten Potentials- relativ guter Übereinstimmung mit experimentellen oder aus theoretischen Überlegungen erschlossenen Werten zu berechnen.

Verbesserungen erwarten wir bei Benutzung einer realistischen Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung, durch genauere Interpolation zwischen Kerninnerem und kernäusserem sowie eine Vergrösserung des Konfigurationsraumes durch Hinzunahme höherer $1p-1h$ -Zustände wie vor allem der niedrigen, deformierten $3p-3h$ -Anregungen.

Teil II : Anhang

A. Fouriertransformation

Fouriertransformierte werden für $m = 1, 2, 3, \dots$ und $n = 0, 1, 2, \dots$ definiert durch

$$F(\omega_1 \dots \omega_m, \omega'_1 \dots \omega'_n) := \left(\frac{1}{2\pi}\right)^n \int dt_1 \dots dt_m dt'_1 \dots dt'_n e^{+i\{\omega_1 t_1 + \dots + \omega_m t_m - \omega'_1 t'_1 - \dots - \omega'_n t'_n\}} F(t_1 \dots t_m, t'_1 \dots t'_n) \quad (F.1)$$

$$F(t_1 \dots t_m, t'_1 \dots t'_n) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^m \int d\omega_1 \dots d\omega_m d\omega'_1 \dots d\omega'_n e^{-i\{\omega_1 t_1 + \dots + \omega_m t_m - \omega'_1 t'_1 - \dots - \omega'_n t'_n\}} F(\omega_1 \dots \omega_m, \omega'_1 \dots \omega'_n) \quad (F.2)$$

und

$$F(\vec{k}_1 \dots \vec{k}_m, \vec{k}'_1 \dots \vec{k}'_n) := \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3n} \int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_m d\vec{r}'_1 \dots d\vec{r}'_n e^{-i\{\vec{k}_1 \vec{r}_1 + \dots + \vec{k}_m \vec{r}_m - \vec{k}'_1 \vec{r}'_1 - \dots - \vec{k}'_n \vec{r}'_n\}} F(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_m, \vec{r}'_1 \dots \vec{r}'_n) \quad (F.3)$$

(F.3)

$$F(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_m, \vec{r}'_1 \dots \vec{r}'_n) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3m} \int d\vec{k}_1 \dots d\vec{k}_m d\vec{k}'_1 \dots d\vec{k}'_n e^{+i\{\vec{k}_1 \vec{r}_1 + \dots + \vec{k}_m \vec{r}_m - \vec{k}'_1 \vec{r}'_1 - \dots - \vec{k}'_n \vec{r}'_n\}} F(\vec{k}_1 \dots \vec{k}_m, \vec{k}'_1 \dots \vec{k}'_n) \quad (F.4)$$

Speziell für Zustandsvektoren $|\Psi\rangle$ ist

$$\langle \vec{k} | \Psi \rangle = \int d\vec{r} e^{-i\vec{k}\vec{r}} \langle \vec{r} | \Psi \rangle, \quad \langle \Psi | \vec{k} \rangle = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int d\vec{r} e^{+i\vec{k}\vec{r}} \langle \Psi | \vec{r} \rangle \quad (\text{F.5})$$

und Matrixelemente transformieren sich folglich nach

$$\langle \vec{k} | Q^{(1)} | \vec{k}' \rangle = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int d\vec{r} d\vec{r}' e^{-i\{\vec{k}\vec{r} - \vec{k}'\vec{r}'\}} \langle \vec{r} | Q^{(1)} | \vec{r}' \rangle \quad (\text{F.6})$$

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | Q^{(2)} | \vec{k}'_1 \vec{k}'_2 \rangle &= \left(\frac{1}{2\pi}\right)^6 \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}'_1 d\vec{r}'_2 \cdot \\ &\quad e^{-i\{\vec{k}_1 \vec{r}_1 + \vec{k}_2 \vec{r}_2 - \vec{k}'_1 \vec{r}'_1 - \vec{k}'_2 \vec{r}'_2\}} \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | Q^{(2)} | \vec{r}'_1 \vec{r}'_2 \rangle \end{aligned} \quad (\text{F.7})$$

B. Sphärische Tensoren (Fa 59)

Ein kogredienter, irreduzibler sphärischer Tensor (operator) $T^{\{j\}}$ vom Rang j , dessen $(2j+1)$ Komponenten T_{j1}^+ mit dem Index 1 numeriert werden, ist eine Menge von Grössen (Operatoren), die sich bei Raumdrehungen in der gleichen Weise transformieren wie die simultanen Eigenvektoren $|j1\rangle$ der Drehpulsoperatoren $\vec{j}^2$ und j_z . Dazu kontragrediente, irreduzible sphärische Tensoren $\tilde{T}^{(j)} = \{T_{j1}\}$ werden durch die Forderung

$$\sum_1 \tilde{T}_{j1} T_{j1}^+ = \text{skalare Kontraktion} \quad (\text{T.1})$$

festgelegt. Wir werden die Adjektiva "kogredient, kontragredient, irreduzibel, sphärisch" bei Tensoren dieser Art wahlweise weglassen bzw. zur Hervorhebung des Wesentlichen benutzen.

Tensorielle Grössen, deren Komplex-Konjugierte definiert sind (Transformationskoeffizienten, Brackets), werden durch Anwendung des Operators K_0 der komplexen Konjugation in dazu kontragrediente Grössen übergeführt, während ein beliebiger kogredienter Tensor $T^{\{j\}} = \{T_{j_1}^+\}$ durch eine spezielle unitäre Transformation K

$$K_{1112}^{\{j\}} := K_{1112}^{(j)} := (-)^{j+1} \delta_{11,-12} \quad (T.2)$$

in einen kontragredienten Tensor $\tilde{T}^{(j)} = \{\tilde{T}_{j_1}\}$ gleichen Rangs transformiert wird:

$$\tilde{T}_{j_1} := (K^{\{j\}} T^{\{j\}})_{j_1} := \sum_{j_1'} K_{1j_1'}^{\{j\}} T_{j_1'}^+ = (-)^{j+1} T_{j-1}^+ \quad (T.3)$$

Analog zeigt das Produkt $K^{(j)} \tilde{T}^{(j)}$ ein kogredientes Transformationsverhalten. Die Matrix $K^{\{j\}}$ ist nur bis auf eine von j unabhängige Phase festgelegt.

Die Operatoren K_0 und K hängen eng mit dem Verhalten von Drehimpulsoperatoren sowie deren Eigenzuständen bzw. -funktionen bei Zeitumkehr zusammen: Während sich für ganzzahlige Bahndrehimpulse aus der Schrödingergleichung ablesen lässt, dass die zeitumgekehrten Eigenfunktionen durch komplexe Konjugation erhalten werden, ist nicht einfach zu übersehen, welche Transformationseigenschaften die Spinoperatoren und deren Eigenzustände aufweisen. Das Problem wurde von Wigner (Wi 32) und Fano-Racah (Fa 59) untersucht. Es zeigt sich, dass die Zeitumkehroperation Z für tensorielle Grössen mit definierten Konjugiert-Komplexen durch

$$Z = K_0 U \quad (T.4)$$

gegeben ist, wobei U eine unitäre Matrix ist. Ohne auf die Begründung näher einzugehen, geben wir noch an, dass man ein konsistentes System erhält, wenn man die zeitumgekehrten Eigenzustände $|j_1\rangle^Z$ der Drehimpulsoperatoren $\vec{j}^2$ und j_z mit Hilfe von K nach

$$|j_1\rangle^Z := K^{\{j\}} |j_1\rangle = (-)^{j+1} |j - 1\rangle \quad (T.5)$$

berechnet (Be 59). Entsprechend erhält man die Locherzeugungsoperatoren $(a_q^{\{j\}})^Z$ aus den Teilchenvernichtungsoperatoren $a_q^{(j)}$ durch

$$(a_q^{\{j\}})^Z = K^{(j)} a_q^{(j)} \quad (T.6)$$

Besonders bequeme Darstellungen im Ortsraum sind für ganzzahlige Drehimpulse L die Kugelflächenfunktionen

$$Y_{L\Lambda} := i^L y_{L\Lambda} \quad (T.7)$$

wobei $y_{L\Lambda}$ die von Condon und Shortley definierten Funktionen sind: Bei dieser Wahl der Phasen ist

$$(K^{\{L\}} Y^{\{L\}})_{L\Lambda} = (-)^{L+\Lambda} Y_{L-\Lambda} = Y_{L\Lambda}^* = (K_O Y^{\{L\}})_{L\Lambda} \quad (T.8)$$

d.h. Zeitumkehroperation und komplexe Konjugation fallen zusammen.

Irreduzible, kogrediente und kontragrediente Produkttensoren

$$(T^{\{j1\}} \times T^{\{j2\}})_{\{j\}}, \quad (\overline{T^{(j1)} \times T^{(j2)}})_{(j)} \quad (T.9)$$

werden durch

$$(T^{\{j1\}} \times T^{\{j2\}})_{j_1}^+ := \sum_{1112} \langle j1 \ j2 \ j \ 1 | j1 \ 11 \ j2 \ 12 \rangle T_{j111}^+ T_{j212}^+ \quad (T.10)$$

und

$$(\overline{T^{\{j1\}} \times T^{\{j2\}}})_{j_1} := \sum_{1112} \langle j1 \ 11 \ j2 \ 12 | j1 \ j2 \ j \ 1 \rangle \tilde{T}_{j111} \tilde{T}_{j212} \quad (T.11)$$

definiert. Die Transformationskoeffizienten sind als Matrixelemente zweier zueinander kontragredienter Transformationen in der reellen Darstellung identisch und den Clebsch-Gordan-Koeffizienten der Condon-Shortley-Konvention gleich:

$$\langle j1 \ j2 \ j \ 1 | j1 \ 11 \ j2 \ 12 \rangle = \langle j1 \ 11 \ j2 \ 12 | j1 \ j2 \ j \ 1 \rangle = \begin{pmatrix} j1 & j2 & j \\ 11 & 12 & 1 \end{pmatrix} \quad (T.12)$$

Mit Hilfe der K-Operation ist es auch möglich, irreduzible Produktensoren aus Tensoren verschiedenen Transformationsverhaltens aufzubauen. Die beiden einzigen Möglichkeiten sind:

$$(K^{(j1)} T^{(j1)} \times T^{\{j2\}}) \{j\} \quad (T.13)$$

und

$$(T^{(j1)} \times K^{\{j2\}} T^{\{j2\}}) (j) \quad (T.14)$$

Nützlich sind die Formeln

$$K^{\{j\}} (T^{\{j1\}} \times T^{\{j2\}}) \{j\} = (K^{\{j1\}} T^{\{j1\}} \times K^{\{j2\}} T^{\{j2\}}) (j) \quad (T.15)$$

und

$$K^{\{j\}} K^{(j)} = (-)^{2j} E^{(j)} \quad (T.16)$$

in denen $E^{(j)}$ eine $(2j+1) \times (2j+1)$ -Einheitsmatrix bezeichnet. Höhere Tensorprodukte lassen sich mit den angegebenen Formeln einfach konstruieren, wobei Umkopplungstransformationen, die verschiedene Arten der Produktbildung verknüpfen, wichtig werden. Für Produkte dritter Ordnung gilt beispielsweise

$$\begin{aligned}
 (T^{\{j_1\}} \times (T^{\{j_2\}} \times T^{\{j_3\}}) \{j_{23}\}) \{J\} = \\
 \sum_{j_{12}} \widehat{j_{12} j_{23}} (-)^{j_1+j_2+j_3+J} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & J & j_{23} \end{Bmatrix} \quad (T.17) \\
 ((T^{\{j_1\}} \times T^{\{j_2\}}) \{j_{12}\} \times T^{\{j_3\}}) \{J\}
 \end{aligned}$$

und für Tensorprodukte vierter Ordnung mit vertauschbaren Tensoren hat die wesentliche Umkopplungstransformation, auf die sich alle anderen zurückführen lassen, die Form

$$\begin{aligned}
 ((T^{\{j_1\}} \times T^{\{j_3\}}) \{j_{13}\} \times (T^{\{j_2\}} \times T^{\{j_4\}}) \{j_{24}\}) \{J\} = \\
 \sum_{j_{12} j_{34}} \widehat{j_{12} j_{34}} \widehat{j_{13} j_{24}} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j_4 & j_{34} \\ j_{13} & j_{24} & J \end{Bmatrix} \quad (T.18) \\
 ((T^{\{j_1\}} \times T^{\{j_2\}}) \{j_{12}\} \times (T^{\{j_3\}} \times T^{\{j_4\}}) \{j_{34}\}) \{J\}
 \end{aligned}$$

Die in den obigen Formeln auftretenden 6-j- und 9-j-Symbole stimmen mit den von Edmonds (Ed 64) definierten Grössen überein.

C. Gleichung für L^0

a) Voraussetzungen:

$$L_{\alpha\lambda, \kappa\beta}^0(\epsilon, \omega) := \frac{i}{2\pi} G_{\alpha\beta}(\epsilon + \omega/2) G_{\lambda\kappa}(\epsilon - \omega/2) \quad (L.1)$$

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} z_\alpha \left\{ \frac{1-n_\alpha}{\omega + \mu - \epsilon_\alpha + i0} + \frac{n_\alpha}{\omega + \mu - \epsilon_\alpha - i0} \right\} + \tilde{G}_{\alpha\beta}(\omega) \quad (L.2)$$

$\tilde{G}_{\alpha\beta}(\omega)$ ist regulär an den Polen von $G_{\alpha\beta}(\omega)$

b) Folgerungen

Mit den Abkürzungen $x := \epsilon + \mu - \frac{\epsilon_\alpha + \epsilon_\kappa}{2}$, $\Delta = \omega - \epsilon_\alpha + \epsilon_\kappa$ lautet die Gleichung für L^0

$$L_{\alpha\lambda, \kappa\beta}^0(\epsilon, \omega) = \frac{i}{2\pi} \left(z_\alpha \delta_{\alpha\beta} \left\{ \frac{1-n_\alpha}{x + \Delta/2 + i0} + \frac{n_\alpha}{x + \Delta/2 - i0} \right\} + \tilde{G}_{\alpha\beta}(\epsilon, \omega) \right) \cdot \quad (L.3)$$

$$\left(z_\kappa \delta_{\kappa\lambda} \left\{ \frac{1-n_\kappa}{x - \Delta/2 + i0} + \frac{n_\kappa}{x - \Delta/2 - i0} \right\} + \tilde{G}_{\kappa\lambda}(\epsilon, \omega) \right)$$

Das Verhalten der einzelnen Summanden wird bestimmt durch das Verhalten der Faktoren

$$\begin{aligned} \frac{1}{(x + \Delta/2 + i0)} \cdot \frac{1}{(x - \Delta/2 + i0)} &= \left(\frac{1}{x - \Delta/2 + i0} - \frac{1}{x + \Delta/2 + i0} \right) \frac{1}{\Delta + \left\{ \begin{smallmatrix} 0 \\ 2i0 \end{smallmatrix} \right\}} \\ &= \left(\frac{P}{x - \Delta/2} \mp i\pi\delta(x - \Delta/2) - \frac{P}{x + \Delta/2} + i\pi\delta(x + \Delta/2) \right) \frac{1}{\Delta + \left\{ \begin{smallmatrix} 0 \\ 2i0 \end{smallmatrix} \right\}} \end{aligned} \quad (L.4)$$

Für $\Delta \approx 0$ kann man diesen Ausdruck approximieren durch

$$\frac{1}{(x + \Delta/2 + i0)(x - \Delta/2 + i0)} \approx \begin{cases} 0 & \text{für } + \\ 2\pi i\delta(x) \frac{1}{\Delta + i0} & \text{für } - \end{cases} \quad (L.5)$$

Analoges gilt, wenn Δ das Vorzeichen wechselt. Also nimmt $L^0(\epsilon, \omega)$ die folgende Gestalt an

$$L_{\alpha\lambda, \kappa\beta}^0(\epsilon, \omega) = -z_\alpha z_\kappa \delta_{\alpha\beta} \delta_{\kappa\lambda} \delta\left(\frac{\epsilon_\alpha + \epsilon_\kappa}{2} - \epsilon - \mu\right). \quad (\text{L.6})$$

$$\left\{ \frac{(1-n_\alpha)n_\kappa}{\omega - \epsilon_\alpha + \epsilon_\kappa + i0} - \frac{(1-n_\kappa)n_\alpha}{\omega - \epsilon_\alpha + \epsilon_\kappa - i0} \right\} + L_{\alpha\lambda, \kappa\beta}^1(\epsilon, \omega)$$

wobei $L_{\alpha\beta, \kappa\lambda}^1(\epsilon, \omega)$ alle bei $\omega \approx (\epsilon_\alpha - \epsilon_\kappa)$ regulären Beiträge zusammenfasst.

Teil III: Tabellen, Abbildungen und Literaturangaben

A. Tabellen:

Tabelle 1: Eingabedaten

a) Nukleonenmasse:	$m = 0.024114166 \text{ MeV}^{-1} \text{F}^{-2}$	
b) Kerndichteparameter:	$r_0 = 1.24 \text{ F}$	$a_0 = 0.65 \text{ F}^{-1}$
c) Potentialparameter (D2.18):	$\alpha_0 = 2.004 \text{ F}^{-1}$ $\lambda_0 = 3.64037 \text{ F}^{-3}$ $R_0 = 0.45 \text{ F}$	$\alpha_1 = 2.453 \text{ F}^{-1}$ $\lambda_1 = 8.6949 \text{ F}^{-3}$ $R_1 = 0.45 \text{ F}$
d) Chemisches Potential:	$\mu_1 = -16.0 \text{ MeV}$	$\mu_2 = 0.0 \text{ MeV}$

Tabelle 2: Einteilchenenergien in MeV für
 O^{16} (Jo63, Ma67, Da68, Ul68) und Ca^{40} (Di68)

Schalenmodellquantenz.			O^{16}		Ca^{40}		
$p=(nlj, \tau=1/2)$		Nr.	$\epsilon_p(\text{exp})$	n_p	$\epsilon_p(\text{exp})$	$\epsilon_p(\text{theor})$	n_p
1 1 1/2	2p _{1/2}	9	23.0	0	- 4.2	- 2.49	0
0 3 5/2	1f _{5/2}	7	22.0	0	- 2.1	- 0.32	0
1 1 3/2	2p _{3/2}	8	20.0	0	- 6.3	- 5.07	0
0 3 7/2	1f _{7/2}	6	15.0	0	- 8.3	-10.06	0
0 2 3/2	1d _{3/2}	4	0.93	0	-15.6	-17.52	1
1 0 1/2	2s _{1/2}	5	- 3.28	0	-18.1	-18.82	1
0 2 5/2	1d _{5/2}	3	- 4.15	0	-21.6	-24.98	1
0 1 1/2	1p _{1/2}	2	-15.6	1		-36.45	1
0 1 3/2	1p _{3/2}	1	-21.74	1		-40.46	1
0 0 1/2	1s _{1/2}	0	-48.0	1		-55.83	1
			$\epsilon_{\text{max}} = -12.2$		$\epsilon = -8.3$		

Tabelle 3a: Anregungsenergien von Zuständen
negativer Parität in O^{16}

EXP = Experimenteller Wert (Aj59, Ma67); Anm. s. Text
 ETM = Ein-Teilchen-Modell-Wert
 KK = Brueckner-Theorie-Rechnungen mit einem
 Kallio-Kolltweit-Potential (Ma67); dort KKA
 HJ = Brueckner-Theorie-Rechnungen mit einem
 Hamada-Johnston-Potential (Ma67); dort HJA
 MI = Rechnungen mit der Migdal-Parametrisierung von
 F für versch. Dichteinterpolationen (Ha68)
 DA = Diese Arbeit

ZUSTAND T J ^π	ENERGIE					
	EXP	ETM	KK	HJ	MI	DA
T=0 0 ⁻	10.94	12.32 22.67	13.34 25.37	9.93 18.79		12.92 24.20
T=0 1 ⁻	7.12 9.58 12.43	12.32 16.53 17.59 18.45 22.67	8.81 10.66 16.92 18.09 24.33	8.01 9.76 18.28 20.06 26.16	9.1-13.3 17.4 19.6 20.1 25.2	10.21 10.99 16.73 17.94 23.54
T=0 2 ⁻	8.88 12.52 13.97	11.45 16.53 17.59 18.46 22.67	12.31 16.77 18.59 19.75 23.22	11.62 16.08 17.36 19.62 22.55		11.95 15.65 17.66 19.18 22.92
T=0 3 ⁻	6.14 11.62	11.45 17.59 22.67	7.09 16.18 21.97	7.14 16.66 22.55	11.5-13.5	6.58 16.22 21.15
T=0 4 ⁻		17.59	18.78	18.80		17.74
T=1 0 ⁻	12.78	12.32 22.67	13.93 26.94	13.40 25.49		13.90 27.29
T=1 1 ⁻	13.1 17.3 ? 22 25	12.32 16.53 17.59 18.45 22.67	14.07 18.10 20.31 23.17 26.14	13.52 17.73 20.87 23.75 25.43		14.11 18.13 20.49 24.23 26.89
T=1 2 ⁻	12.96	11.45 16.53 18.46 17.59 22.67	13.21 17.98 19.43 20.86 23.95	13.36 16.85 19.00 20.57 24.28		13.29 18.45 19.41 21.18 24.07
T=1 3 ⁻	13.26	11.45 17.59 22.67	13.22 18.74 24.94	13.66 18.91 25.22		13.59 19.03 25.53
T=1 4 ⁻		17.59	19.59	18.83		19.54

Tabelle 3b:

Normierte Eigenvektoren der niedrigsten Anregungszustände negativer Parität in O^{16}

obere Zeile: U-Vektor ; untere Zeile: W-Vektor ; - = verbotene Kombination ; Norm = 10
Numerierung der Ein-Teilchen-Zustände wie in Tabelle 2 angegeben

Zustand $T J^{\pi}$	Energie (MeV)	Kombination von Ein-Teilchen-Zuständen $g1/g3$						k
		2/3	2/4	2/5	1/3	1/4	1/5	
0 0 ⁻	12.92	- -	- -	10.00 -0.30	- -	0.45 0.01	- -	1.00
0 1 ⁻	10.99	- -	-1.80 0.44	9.00 0.15	-2.56 0.60	0.34 -0.18	3.12 -0.02	1.25
0 2 ⁻	11.95	9.82 -0.15	0.48 0.15	- -	1.78 -0.17	-0.29 0.03	0.44 0.00	1.04
0 3 ⁻	6.58	9.37 -2.39	- -	- -	3.64 -1.56	-3.12 1.65	- -	1.39
0 4 ⁻	17.74	- -	- -	- -	1.00 0.01	- -	- -	1.00
1 0 ⁻	13.90	- -	- -	9.96 0.17	- -	0.98 -0.13	- -	1.01
1 1 ⁻	14.11	- -	-0.04 0.14	9.87 0.06	-1.41 0.00	-0.43 -0.07	-0.62 0.19	1.03
1 2 ⁻	13.29	9.67 0.39	0.00 -0.18	- -	2.36 -0.23	0.65 -0.21	0.95 -0.09	1.08
1 3 ⁻	13.59	9.81 0.11	- -	- -	-2.01 0.14	0.23 -0.56	- -	1.05
1 4 ⁻	19.54	- -	- -	- -	1.00 0.01	- -	- -	1.00

Tabelle 4a: Anregungsenergien von Zuständen
negativer Parität in Ca⁴⁰

EXP = Experimenteller Wert (En67, Ka68)

ETM = Ein-Teilchen-Modell-Wert, exp. Energien

TA = Rechnungen mit dem Tabakin-Potential (Di68)

MI = Rechnungen mit der Migdal-Parametrisierung
 von F (Bi67)

DAA = Diese Arbeit, experimentelle Ein-Teilchen-Energien

DAB = Diese Arbeit, Schalenmodell-Ein-Teilchen-Energien

ZUSTAND T J ^π	ENERGIE					
	EXP	ETM	TA	MI	DAA	DAB
T=0 0 ⁻		9.3	7.5		9.86	13.00
		13.9			14.15	16.75
		19.5			20.81	25.95
T=0 1 ⁻					7.11	6.31
	6.95?	9.3	7.35		8.67	11.88
	9.61?	11.4	9.7		10.09	12.13
	10.33?	11.8	10.8		10.39	13.71
		13.3			13.59	16.46
		13.5			14.07	17.22
		13.9			14.54	18.66
		15.3			20.32	25.43
		19.5				
T=0 2 ⁻	7.53?	7.3	7.7		7.93	8.13
		9.3	9.2		9.34	12.42
		11.4			11.45	13.84
		11.8			11.95	14.41
		13.3			12.29	15.02
		13.5			14.01	17.22
		15.3			15.37	18.72
		16.0			16.24	19.96
		17.4			17.75	22.82
		19.5			19.86	25.00
T=0 3 ⁻	3.73	7.3	2.8	2-5	3.55	4.47
	6.28	9.3	7.8		7.92	7.93
	6.59	9.8	8.7		9.03	11.63
		13.3			11.67	13.49
		13.5			13.66	16.75
		15.3			14.83	18.07
		16.0			15.66	19.51
		17.4			17.10	22.14
		19.5			19.34	24.46
T=0 4 ⁻	5.61	7.3	7.25		7.28	7.44
		9.8			10.03	8.99
		13.3			13.32	14.93
		13.5			13.56	17.14
		15.3			15.48	20.08
		19.5			19.47	24.63

Tabelle 4a: Fortsetzung

ZUSTAND T J ^π	ENERGIE					
	EXP	ETM	TA	MI	DAA	DAB
T=0 5 ⁻	4.49	7.3 13.3 19.5	5.2	5-6.5	5.63 12.89 18.41	5.90 14.53 23.47
T=1 0 ⁻		9.3 13.9 19.5	10.2		10.66 14.88 22.78	13.73 17.24 27.96
T=1 1 ⁻		9.3 11.4 11.8 13.3 13.5 13.9 15.3 19.5	10.0	9.5	10.03 12.39 13.06 14.57 15.34 16.76 18.85 21.99	13.19 14.88 16.05 17.28 17.88 20.56 22.42 27.07
T=1 2 ⁻	8.47	7.3 9.3 11.4 11.8 13.3 13.5 15.3 16.0 17.4 19.5	9.0 9.8	8.6 9.8	8.87 9.64 11.89 12.71 14.08 15.01 15.96 16.90 18.40 20.56	9.12 12.83 14.70 15.56 16.39 18.02 19.52 20.59 23.42 25.65
T=1 3 ⁻	7.69	7.3 9.3 9.8 13.3 13.5 15.3 16.0 17.4 19.5	7.9 9.5	7.9 10.0	8.01 9.86 10.88 13.74 14.69 15.67 16.78 18.22 20.74	8.08 9.71 13.02 15.88 17.79 19.40 20.37 23.26 25.83
T=1 4 ⁻	7.66	7.3 9.8 13.3 13.5 15.3 19.5	8.0	7.7	7.66 10.39 14.01 14.44 16.04 19.87	7.79 9.42 15.69 18.13 20.60 25.01
T=1 5 ⁻	8.54	7.3 13.3 19.5	8.8	8.8	8.45 13.75 20.80	8.62 15.36 25.99

Tabelle 4b: Normierte Eigenvektoren der niedrigsten Anregungszustände negativer Parität in Ca

obere Zeile: U-Vektor ; untere Zeile: W-Vektor ; - = verbotene Kombination ; Norm = 10

Numerierung der Ein-Teilchen-Zustände wie in Tabelle 2 angegeben

Zustand T J ^π	Energie (MeV)	Kombination von Ein-Teilchen-Zuständen q l/q3												k
		5/6	5/7	5/8	5/9	4/6	4/7	4/8	4/9	3/6	3/7	3/8	3/9	
0 0 ⁻	9.86	- -	- -	- -	0.83 0.04	- -	- -	10.00 -0.13	- -	- -	0.28 -0.02	- -	- -	1.01
0 1 ⁻	8.67	- -	- -	-0.08 0.43	-0.38 -0.24	- -	-1.62 0.32	7.25 -0.06	5.32 -0.25	-2.36 0.40	0.14 -0.08	3.39 -0.29	- -	1.93
0 2 ⁻	7.93	- -	0.05 -0.01	0.69 -0.08	- -	9.85 -0.08	0.47 -0.11	-0.56 0.04	0.01 0.01	1.42 -0.22	-0.08 -0.02	0.15 -0.01	0.14 -0.24	1.03
0 3 ⁻	3.55	5.87 -2.66	-2.69 1.58	- -	- -	6.09 -2.06	3.31 -1.82	3.65 -1.56	- -	4.19 -2.31	-1.66 1.05	1.46 -0.83	-1.42 0.85	4.18
0 4 ⁻	7.28	0.32 -0.04	- -	- -	- -	9.99 -0.11	0.17 -0.04	- -	- -	0.40 -0.11	-0.14 0.02	0.10 -0.02	- -	1.00
0 5 ⁻	5.63	- -	- -	- -	- -	9.93 -1.24	- -	- -	- -	1.44 -0.56	-1.27 0.66	- -	- -	1.06
1 0 ⁻	10.66	- -	- -	- -	0.97 0.06	- -	- -	9.94 0.27	- -	- -	0.52 -0.09	- -	- -	1.01
1 1 ⁻	10.03	- -	- -	-0.54 0.01	-0.34 0.05	- -	0.23 0.05	9.59 -0.08	-2.70 -0.04	-0.40 -0.03	-0.16 -0.02	0.36 0.11	- -	1.09
1 2 ⁻	8.87	- -	0.21 -0.05	1.33 -0.17	- -	9.64 0.40	-0.46 0.09	-1.75 0.05	0.04 0.00	1.43 -0.20	0.43 -0.23	0.25 -0.06	0.22 -0.05	1.08
1 3 ⁻	8.01	-2.05 -0.02	-0.14 -0.16	- -	- -	9.74 -0.01	-0.27 0.13	-0.95 -0.04	- -	-0.29 0.00	-0.08 -0.22	0.01 0.01	-0.08 -0.02	1.06
1 4 ⁻	7.66	1.10 -0.13	- -	- -	- -	9.93 0.12	0.17 -0.04	- -	- -	0.38 -0.10	0.13 -0.11	0.16 -0.03	- -	1.02
1 5 ⁻	8.45	- -	- -	- -	- -	9.97 0.14	- -	- -	- -	-0.83 0.14	0.20 -0.40	- -	- -	1.01

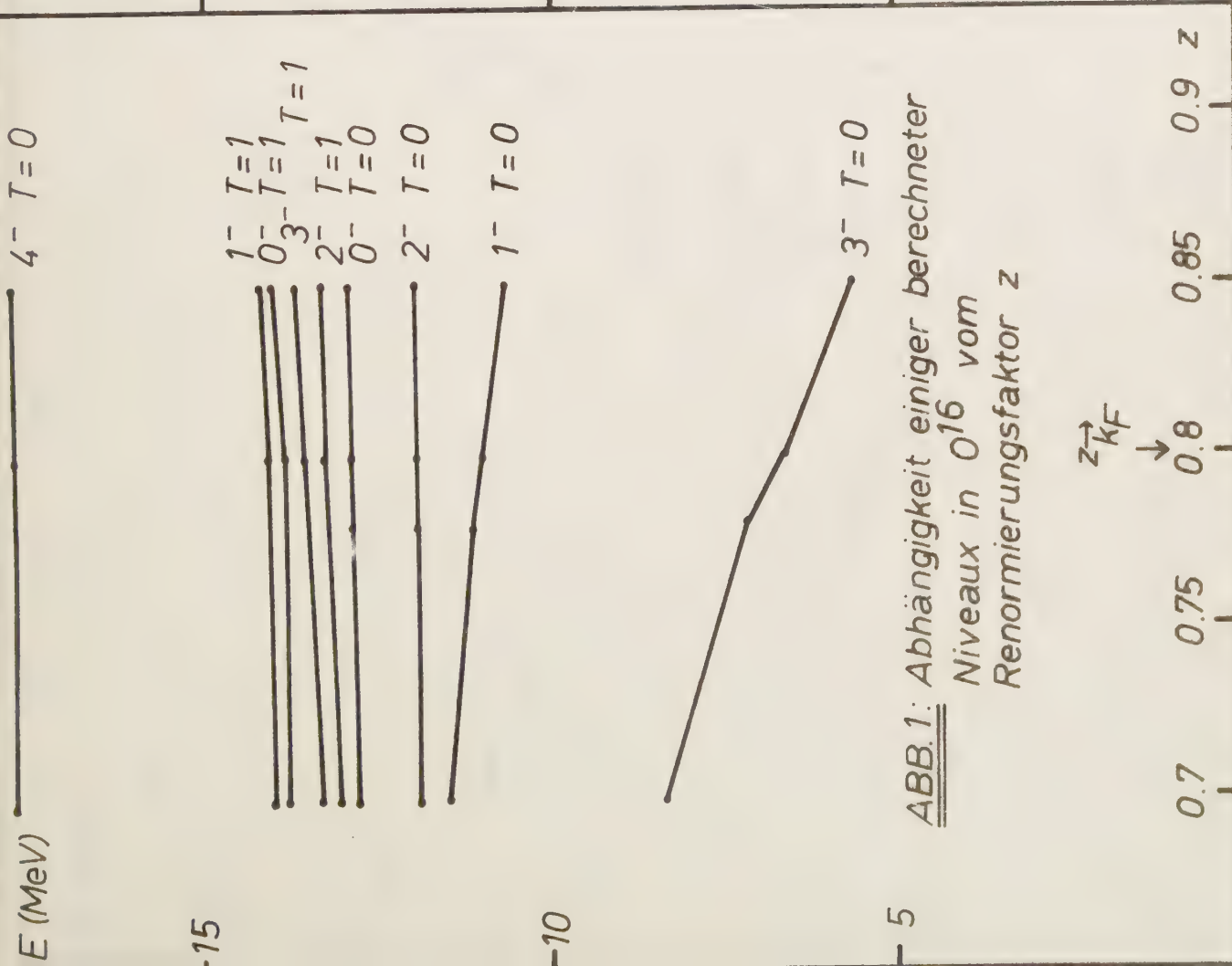


ABB.1: Abhängigkeit einiger berechneter Niveaux in O^{16} vom Renormierungsfaktor z

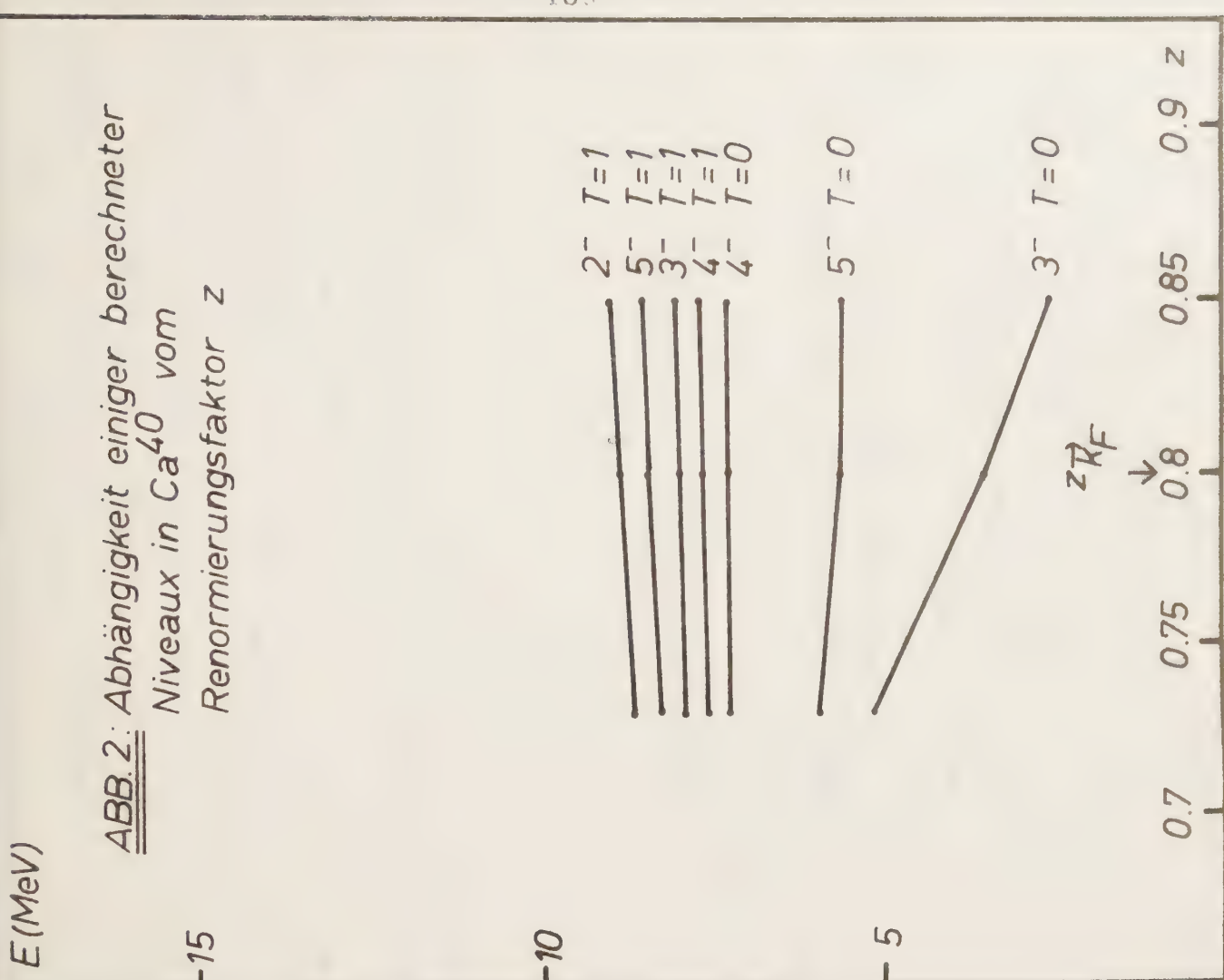


ABB.2: Abhängigkeit einiger berechneter Niveaux in Ca^{40} vom Renormierungsfaktor z

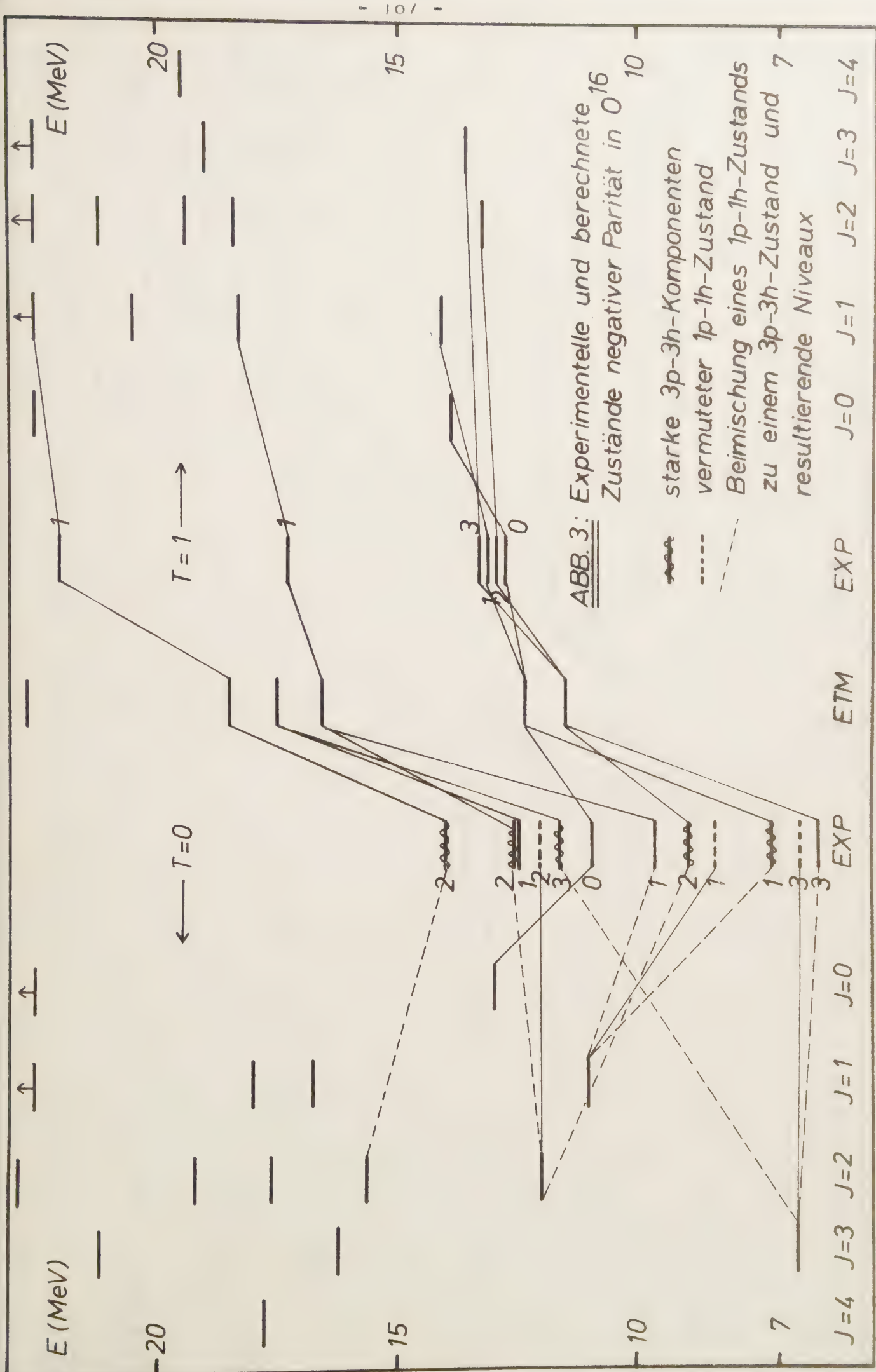
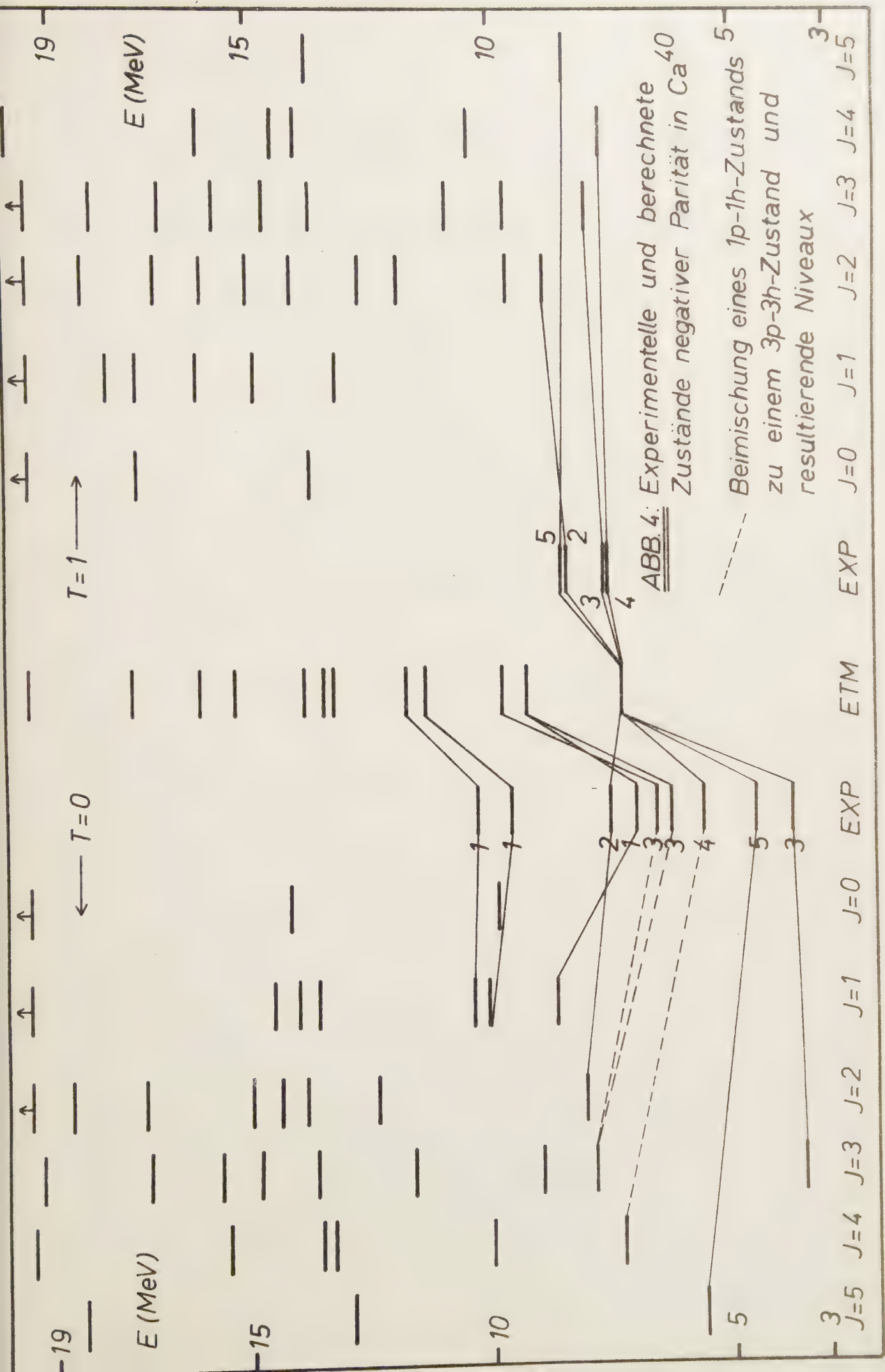


ABB. 3: Experimentelle und berechnete ^{16}O Zustände negativer Parität in ^{16}O

- starke 3p-3h-Komponenten
- vermuteter 1p-1h-Zustand
- - - Beimischung eines 1p-1h-Zustands zu einem 3p-3h-Zustand und resultierende Niveaux

J=4 J=3 J=2 J=1 J=0 J=0 J=1 J=2 J=3 J=4



C. Literaturangaben:

- Ab63 Abrikosov, Gorkov and Dzyaloshinsky, Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics (Prentice Hall, New York, 1963)
- Ab65 Abramowitz and Stegun, Handbook of Mathematical Functions (Dover Publications, New York, 1965)
- Aj59 Ajzenberg-Selove and Lauritsen, Nucl.Phys.11(1959)1
- Ba66 Baranger and Davies, Nucl.Phys.79(1966)403
- Be59 Bell, Nucl.Phys.12(1959)117
- Bi67 Birbrair, Bukat and Guman, Sov.J.Nucl.Phys.4(1967)337
- Br61 Brown, Castillejo and Evans, Nucl.Phys.22(1961)1
- Br63 Brenig and Wagner, Z.Phys.173(1963)484
- Br65 Brenig, Adv.Theor.Phys.1(1965)59
- Br65a Brown and Green, Phys.Lett.15(1965)168
- Br67 Brody and Moshinsky, Tables of Transformation Brackets for Nuclear Shell Model Calculations (Gordon and Breach, New York/London, 1967)
- Co68 Cohen, Phys.Lett.27B(1968)271
- Da68 Da Providencia and Sharkin, Nucl.Phys.A108(1968)609
- Di68 Dieperink, Leenhouts and Brussard, Nucl.Phys.A116(1968)556
- Ed64 Edmonds, Drehimpulse in der Quantenmechanik (Bibliographisches Institut, Mannheim, 1964)
- E155 Elliot and Skyrme, Proc.Roy.Soc.A232(1955)561
- En67 Endt and Van Der Leun, Nucl.Phys.A105(1967)1
- Fa59 Fano and Racah, Irreducible Tensorial Sets (Academic Press, New York, 1959)
- Fe65 Fetter and Watson, Adv.Theor.Phys.1(1965)115
- Fe65a Federmann and Talmi, Phys.Lett.15(1965)168
- Fe66 Federmann, Phys.Rev.Lett.17(1966)1055
- Fr61 Francis, The Computer Journal, Vol.4, No.3(1961)
- Fr62 Francis, The Computer Journal, Vol.4, No.4(1962)
- Ga58 Galitzki and Migdal, Sov.Phys.JETP 7(1958)96
- Geb7 Gerace and Green, Nucl.Phys.A93(1967)110
- Gi64 Gillet and Vinh Mau, Nucl.Phys.54(1964)321
- Gi64a Gillet and Sanderson, Nucl.Phys.54(1964)472

- Gi67 Gillet and Sanderson, Nucl.Phys.A91(1967)292
Gu65 Guman and Birbrair, Nucl.Phys.70(1965)545
Gu68 Gunye, Nucl.Phys.A118(1968)174
Ha62 Hamada and Johnston, Nucl.Phys.34(1962)382
Ha65 Hasselgreen, Renberg, Sundberg and Tibell, Nucl.Phys.69(1965)81
Ha68 Hacker and Mikeska, Phys.Lett.26B(1968)357
Jo63 Jolly, Phys.Lett.5(1963)289
Ju63 Judd, Operator Techniques in Atomic Spectroscopy (McGraw Hill, New York/London, 1963)
Ka64 Kallio and Kolltveit, Nucl.Phys.53(1964)87
Ka68 Kashy and Snelgrove, Phys.Rev.172(1968)1124
Ke66 Kerman, Svenne and Villars, Phys.Rev.147(1966)710
Ki67 Kirzhnits, Field Theoretical Methods in Many-Body Systems (Pergamon Press, Oxford, 1967)
Ku66 Kuo and Brown, Nucl.Phys.85(1966)40
Kr66 Kramer and Moshinsky, Nucl.Phys.82(1966)241
La56 Landau, Sov.Phys.JETP 3(1956)920
La57 Landau, Sov.Phys.JETP 5(1957)101
La58 Landau, Sov.Phys.JETP 8(1958)70
La62 Lassila, Hull, Ruppel, McDonald and Breit, Phys.Rev.126(1962)881
La64 Lane, Nuclear Theory (Benjamin Inc., New York/Amsterd., 1964)
Lu60 Luttinger and Ward, Phys.Rev.118(1960)1417
Lu60a Luttinger, Phys.Rev.119(1960)1153
Lu60b Luttinger, Phys.Rev.121(1960)942
Ma59 Martin and Schwinger, Phys.Rev.115(1959)1342
Ma67 Mavromatis, Markiewicz and Green, Nucl.Phys.A90(1967)101
Me65 Meldner, Süßmann and Ulrici, Z.Naturf.20a(1965)1217
Mi57 Migdal, Sov.Phys.JETP 5(1957)333
Mi63 Migdal, Sov.Phys.JETP 16(1963)1366

- Mi64a Migdal, Nucl.Phys.51(1964)561
- Mi64b Migdal, Nucl.Phys.57(1964)29
- Mi65 Migdal, Many-Body Description of Nuclear Structure and Reactions (Int.School of Physics "Enrico Fermi",Varennna 1965)
- Mo59 Moshinsky, Nucl.Phys.13(1959)104
- No62 Nozières and Luttinger, Phys.Rev.127(1962)1423,1431
- Pi62 Pinkston, Nucl.Phys.37(1962)312
- Pu61 Puff, Ann.Phys.(N.Y.) 13(1961)317
- Re63 Reynolds and Puff, Phys.Rev.130(1963)1877
- Sc64 Schultz, Quantum Field Theory and the Many-Body Problem (Gordon and Breach, New York/London, 1964)
- St66 Stroud and Don Secrest, Gaussian Quadrature Formulas (Prentice Hall, New York, 1966)
- Su65 Süßmann, Atom- und Molekülphysik(Skriptum,Frankfurt/M,1965)
- Ta62 Talmi, Rev.Mod.Phys.34(1962)704
- Ta64 Tabakin, Ann.Phys.(N.Y.) 30(1964)51
- Th61 Thouless, Nucl.Phys.22(1961)78
- Th64 Thouless, Quantenmechanik der Vielteilchensysteme (Bibliographisches Institut, Mannheim, 1964)
- Ul68 Ulrici, Private communication
- Wa64 Wagner, Z.Phys.178(1964)146
- Wa66 Walsh (Ed.), Numerical Analysis (Academic Press,London,1966) dort: Wilkinson, Calculation of Eigensystems of Matrices
- We66 Weigel, Habilitationsschrift (Frankfurt/M, 1966)
- We67 Wegmann, Dissertation (Frankfurt/M, 1967)
- We68 Weigel, Private communication
- Wi32 Wigner, Göttinger Nachrichten (1932)546
- Wi65 Wilkinson, The Algebraic Eigenvalue Problem (Clarendon Press, Oxford, 1965)
- Ya54 Yamaguchi, Phys.Rev.95(1954)1628
- Za65 Zamick, Phys.Lett.19(1965)580

Ich danke Herrn Professor Dr. G. S ü ß m a n n für die Anregung zu dieser Arbeit und sein vielseitig förderndes Interesse.

Herrn Dr. M. W e i g e l bin ich wegen vieler klärender Diskussionen und Hinweise zu besonderem Dank verpflichtet, ebenso Herrn Dr. G. W e g m a n n , der mir half, die Grundlagen dieser Arbeit zu verstehen.

Mein Dank gilt auch der Deutschen Forschungsgemeinschaft, die durch Bereitstellung von Mitteln die Durchführung der numerischen Rechnungen am Deutschen Rechenzentrum in Darmstadt sowie am Max Planck-Institut für Plasmaphysik in Garching ermöglichte.

Herrn K.T.R. Davies vom Oak Ridge National Laboratory danke ich sehr für die freundliche Überlassung von Programmen.

Lebenslauf

Ich wurde am 10.7.1941 als Sohn des Wirtschaftsprüfers Dr. Ewald Haug und dessen Ehefrau, Dr. Irmgard Haug, geb. Warnemünde, in Essen geboren. Vom Herbst 1947 bis Ostern 1951 absolvierte ich die Volksschule und anschliessend die Wöhlerschule, Realgymnasium für Jungen, in Frankfurt/Main. Im Sommer 1957 wurde ich auf ein Jahr nach den USA beurlaubt und besuchte in dieser Zeit die "Phillips Andover Academy" in Andover/Mass. Nach meiner Rückkehr an die Wöhlerschule bestand ich Ostern 1960 die Reifeprüfung.

Danach leistete ich ein Jahr Grundwehrdienst und wurde nach weiteren Übungen zum Leutnant d.R. befördert.

Zu Beginn des SS 1961 immatrikulierte ich mich als Student der Physik an der Johann Wolfgang Goethe-Universität zu Frankfurt/Main, wo ich im SS 1963 die Diplomvorprüfung bestand. Während des SS 1964 war ich ordentlicher Hörer an der philosophischen Fakultät der Leopold-Franzens-Universität in Innsbruck, danach fertigte ich eine Diplomarbeit am Institut für Kernphysik der Universität Frankfurt an und bestand am 26.5.1966 die Diplomhauptprüfung in Physik. Seither arbeitete ich als Doktorand bei Herrn Professor Dr. Georg Süßmann in Frankfurt/Main bzw. München.

Meine akademischen Lehrer sind aus beiliegendem Verzeichnis zu ersehen.

Akademische Lehrer

=====

Physik:

Prof. Dr. F. Cap

Prof. Dr. H. Dänzer

Prof. Dr. W. Greiner

Prof. Dr. J. Kolb

Prof. Dr. W. Martienssen

Prof. Dr. H. Müser

Prof. Dr. E. Schopper

Prof. Dr. R. Steinmaurer

Prof. Dr. G. Süßmann

Mathematik:

Prof. Dr. E.-A. Behrens

Prof. Dr. W. Franz

Prof. Dr. W. Gröbner

Prof. Dr. R. Moufang

Prof. Dr. F. Stummel

Chemie:

Prof. Dr. P. Royen

Prof. Dr. Th. Wielandt

